

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



**CENTRE UNIVERSITAIRE DE TISSEMSILT**

**Institut Des Sciences Et Technologies**

**Département Des Sciences De La Matière**

# *MEMOIRE DE MASTER*

*Présenté par :*

- **Omar Mahia**
- **Mebarka Belbagrat**

*Filière : physique*

*Spécialité : Nano-Physique*

**Intitulé :**

**Le modèle mathématique dans la physique des nanomatériaux**

*Devant le jury composé de :*

**PRÉSIDENT : Mr. DAHMANE Fathallah      MCA.Centre universitaire de Tissemsilt**

**ENCADREUR : Mr. BOUMIA Lakhdar      MCB.Centre universitaire de Tissemsilt**

**EXAMINATEUR: Mr. MOKHTARI Mohamed MCA.Centre universitaire de Tissemsilt**

**Année universitaire : 2018/2019**

## Sommaire

Liste des figures .....	
Liste des tableaux .....	
Introduction .....	2
<b>Chapitre I : Le modèle mathématique.....</b>	<b>4</b>
I) Généralités.....	5
I.1 Modèle mathématique.....	5
I.2 Concept de variable.....	5
I.2.1 Modélisation mathématique .....	6
I.2.2 Pourquoi faisons-nous de la modélisation mathématique.....	6
I.2.3 Les principales du modèle mathématique.....	6
I.2.4 Multiplicité des modélisations .....	9
I.2.5 Typologie de modèle.....	9
I.3 Physique et Mathématiques.....	11
I.4 Informatique et mathématiques.....	12
I.5 Les objectifs pédagogiques .....	12
I.6 Comment créer un modèle ?.....	13
I.7 Le modèle mathématique dans les nanomatériaux.....	15
<b>Chapitre II : Les nanomatériaux en général.....</b>	<b>18</b>
II) Les nanomatériaux.....	19
II.1 Définition.....	19
II.2 Où trouve-t-on les nanomatériaux?.....	19

II.3 Fabrication.....	20
II.4 Utilisations.....	22
II.5 Les risques liés à l'utilisation des nanomatériaux.....	23
II.5.1 Polémiques autour des nanomatériaux.....	23
<b>Chapitre III : Les nanotubes de carbone .....</b>	<b>25</b>
III) Les nanotubes de carbone.....	26
III.1. Les formes allotropiques du carbone.....	26
III.1.1. Les différentes variétés allotropiques du carbone.....	27
III.1.1.a. Le graphite.....	27
III.1.1.b. Le diamant.....	27
III.1.1.c. Les fullerènes.....	28
III.2 Structure des nanotubes de carbone .....	30
III.2.a. Les nanotubes monocouches.....	31
III.2.b. Les nanotubes de carbone multicouches.....	35
III.3 Fabrication, Propriétés et applications.....	36
III.3.1 Fabrication.....	36
III.3.1.1 Les méthodes de synthèse.....	36
1. Arc électrique.....	36
2. Ablation laser.....	36
3. Réacteur solaire.....	36
III.3.2 Les propriétés.....	37
III.3.2.1. les propriétés physiques.....	37
III.3.2.1.1. Propriétés mécaniques.....	38

III.3.2.1.2. Propriétés électroniques.....	41
III.3.2.1.3. Propriétés thermiques.....	42
III.3.2.1.4. Propriétés optiques.....	43
III.3.2.1.5. Propriétés de forme.....	44
III.3.2.1.6. Propriétés d'émission de champ.....	44
III.3.2.2 les propriétés chimiques.....	45
<b>Chapitre IV : Résultats et discussion .....</b>	<b>46</b>
IV.2. Formulations théoriques .....	47
IV.2.1. Hypothèses de base .....	47
IV.2.2. Cinématique .....	48
IV.2.3. Relations constitutive .....	48
IV.2.4 équations de mouvement .....	49
IV.3.1. Solution analytique de nanobeam simplement supporté .....	51
IV.3.2. Flambage .....	51

# Introduction

## Introduction

La physique et les mathématiques sont étroitement mêlées depuis toujours. Tantôt c'est la première qui conduit à développer les mathématiques impliquées par les lois de la nature, tantôt des structures mathématiques élaborées sans référence au monde extérieur se trouvent être précisément adaptées à la description de phénomènes découverts pourtant postérieurement. C'est là l'efficacité déraisonnable des mathématiques dans les sciences de la nature dont parlait Eugène Wigner. Jamais les interactions entre physique et mathématiques n'ont été plus intenses qu'à notre époque, jamais la description des phénomènes naturels n'a requis des mathématiques aussi savantes qu'aujourd'hui. Pourtant il est important de comprendre la différence de nature entre ces deux disciplines. La physique n'établit pas de théorèmes ; jusqu'à présent elle se contente de modèles dont les capacités à prédire, et la comparaison avec l'expérience établissent la validité, avec une économie dans la description et une précision parfois confondantes.

En physique-chimie une large palette de langages scientifiques est activée, que ce soit au niveau de la démarche expérimentale avec les mesures et leurs exploitations graphiques, ou au niveau de la démarche de modélisation avec l'élaboration et l'utilisation de relations littérales entre des grandeurs physiques.

Afin de résoudre un problème technique, il est d'abord essentiel de le comprendre par l'observation et l'expérience, puis de le formaliser par la modélisation au travers de variables, coefficients, lois d'évolution, lois d'états, ... qui ont été déduits de la phase de compréhension grâce aux apports des experts du domaine. Ainsi, modéliser consiste à créer un modèle mathématique qui capture le concept d'un phénomène physique ou d'interaction, grâce aux apports des experts techniques du domaine au travers de leur vision et de leur expérience.

D'autre part, les chercheurs peuvent construire des modèles prédictifs alimentés par des algorithmes d'analyse des données, qui permettent de mieux anticiper certains phénomènes afin de les contrôler ou d'apporter des solutions alternatives.

Dans le domaine des sciences appliquées, un modèle mathématique est un type de modèle scientifique qui emploie un formulisme mathématique pour exprimer des relations, des prédictions, des variables, des paramètres, des entités et des relations entre des variables et/ou des entités ou opérations.

Ces modèles servent à analyser les comportements de systèmes complexes dans des situations difficiles à observer dans la réalité.

Les modèles des sciences physiques constituent une traduction de la réalité physique permettant d'appliquer les instruments et les techniques des théories mathématiques dans l'étude du comportement de systèmes complexes. À l'inverse, il est possible de transposer les résultats numériques à la réalité physique.

Les nanotechnologies constituent un champ de recherche et de développement multidisciplinaire qui reposent sur la connaissance et la maîtrise de l'infiniment petit. Elles

regroupent, plus précisément, l'ensemble des techniques qui permettent de fabriquer, de manipuler et de caractériser la matière à l'échelle nanométrique. Les nanotechnologies sont la formalisation des concepts et des procédés issus des nanosciences c'est à dire des sciences qui visent à étudier et à comprendre les propriétés de la matière à l'échelle de l'atome et de la molécule.

Les nanomatériaux constituent un domaine de recherche en plein développement, soutenu par une avancée considérable des outils de synthèse et de caractérisation de matériaux à l'échelle nanométrique. Ces dernières décennies, un intérêt grandissant a été porté sur ces nouveaux matériaux tant sur le plan fondamental que sur le plan industriel. En effet, la réduction de la taille d'un matériau à une échelle nanométrique peut conduire à des changements considérables de ses propriétés physico-chimiques, très différentes de celles du matériau massif.

les nanotubes se présentent comme des tubes creux concentriques séparés de 0,34 nanomètre (parfois il n'y a qu'un seul tube), avec un diamètre interne de l'ordre du nanomètre et une longueur de l'ordre de quelques micromètres. Ces structures allongées sont éventuellement fermées à leurs extrémités par des pentagones de carbone caractéristiques des fullerènes.

Un tel filament présente une résistance 100 fois supérieure à l'acier, pour un poids divisé par six, et cela avec une résistance peu commune aux hautes températures. Leur diamètre est de l'ordre du milliardième de millimètre. Cette valeur est réellement difficile à appréhender pour l'esprit humain, mais pour la comprendre, il suffit de se dire qu'un nanotube de carbone d'une longueur équivalent à la distance Terre-Lune, enroulé sur lui-même, occuperait le volume qu'un pèpin d'orange.

Leurs propriétés électriques, mécaniques et thermiques laissent entrevoir de nombreuses applications, notamment dans les domaines de la microélectronique, des matériaux (car ils sont potentiellement cent fois plus résistants et six fois plus légers que l'acier), pour le stockage de l'hydrogène.

Les nanotubes de carbone, dotés de propriétés extraordinaires, sont un constituant essentiel de matériaux inédits performants. Les progrès attendus dans leur conception offriront de nouvelles applications étonnantes.

Notre travail consiste à donner un modèle mathématique sur le nanotube de carbone

Ce travail est divisé en quatre parties.

- Le 1<sup>er</sup> chapitre : modèle mathématique.
- Le 2<sup>ème</sup> chapitre : les nanomatériaux en général.
- Le 3<sup>ème</sup> chapitre : les nanotubes de carbone.
- Enfin le 4<sup>ème</sup> chapitre : les résultats et discussion.

**Chapitre I**  
**Le modèle mathématique**



## I) Généralités

### I.1. Modèle mathématique

les scientifiques et les ingénieurs traitent avec des systèmes complexes, ils plus particulièrement besoin des méthodes spécifiques. Pour casser la complexité d'un système donc ils utilisent des descriptions simplifiées de ce système c'est-à-dire des modèles. [1]

**Un modèle:** est une représentation miniature de quelque chose; un motif de quelque chose à faire; un exemple d'imitation ou d'émulation; une description ou l'analogie utilisée pour aider à visualiser quelque chose (par exemple, un atome) qui ne peut pas être observée directement; un système de postulats, de données et d'inférences présentés comme un description mathématique d'une entité ou d'un état de fait.

**Un modèle mathématique** est une traduction d'une observation dans le but de lui appliquer les outils, les techniques et les théories mathématiques, puis généralement, en sens inverse, la traduction des résultats mathématiques obtenus en prédictions ou opérations dans le monde réel. Le modèle mathématique est aussi une série d'équations ou de représentations graphiques qui décrivent des relations entre variables d'une manière précise. [2]

Les modèles mathématiques sont utilisés particulièrement en biologie, ingénierie électrique et physique mais également dans d'autres domaines comme en économie, sociologie et science politique.[3]

### I.2. Concept de variable

On appelle "variable" toute expression algébrique (habituellement une seule lettre :  $y$ ,  $z$ , par laquelle est remplacée une valeur (physique, économique, temporelle, etc.) inconnue.

Le rôle de la variable est donc d'occuper la position que prendrait une valeur si celle-ci était disponible. [4]

### I.2.1. Modélisation mathématique

Le procédé par lequel nous utilisons des expressions mathématiques pour décrire une situation quantitative réelle s'appelle **la modélisation**.

Modéliser consiste à écrire en notation mathématique ce qui est exprimé d'abord en mots en faisant intervenir des variables au besoin. [5]

### I.2.2. Pourquoi faisons-nous de la modélisation mathématique

Puisque la modélisation des dispositifs et des phénomènes est essentielle à la fois pour l'ingénierie et la science, ingénieurs et scientifiques ont des raisons très pratiques pour faire de la modélisation mathématique. En outre, des ingénieurs, des scientifiques et des mathématiciens veulent faire l'expérience de la joie de formuler et de résoudre problèmes mathématiques.

### I.2.3. Les principes du modèle mathématique

La modélisation mathématique est une activité fondée sur des principes qui repose sur deux principes : principes généraux ou méta-principes formulés comme des questions sur les intentions et les objectifs de la modélisation mathématique. Ces méta-principes sont presque de nature philosophique.

Nous allons maintenant exposer ces principes de modélisation méthodologique sont également capturés dans la liste suivante de questions et réponses:

**Pourquoi?** Que cherchons-nous? Identifiez le besoin du modèle.

**Trouver?** Que voulons-nous savoir? Énumérer les données que nous recherchons

**Donner?** Que savons-nous? Identifiez les données pertinentes disponibles.

**Assumer?** Que pouvons-nous assumer? Identifier les circonstances qui s'appliquent

**Comment?** Comment devrions-nous regarder ce modèle? Identifier le gouvernant principes physiques.

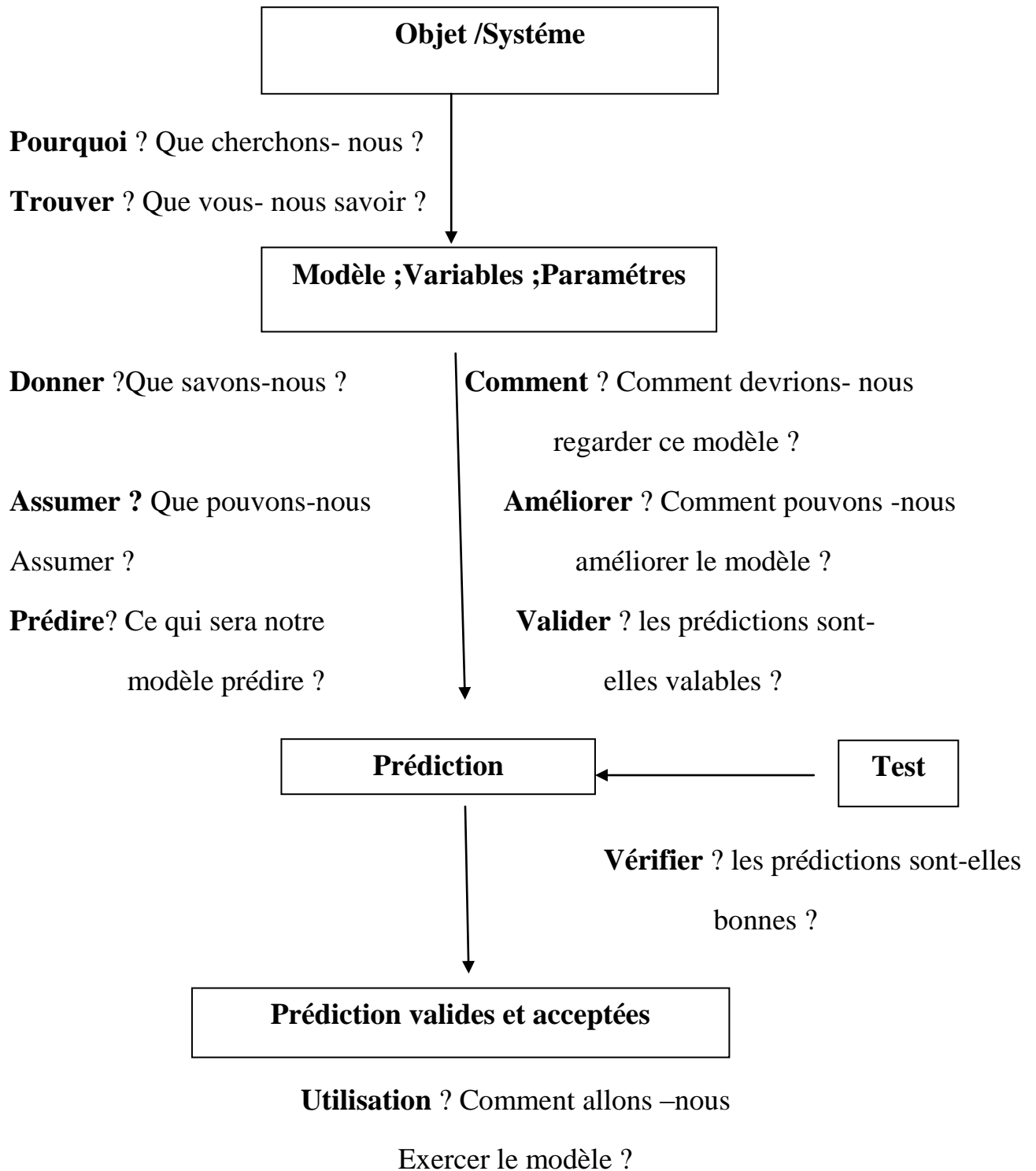
**Prédire?** Que va prédire notre modèle? Identifiez les équations qui vont être utilisés, les calculs qui seront faits et les réponses qui seront résultat.

**Valider?** Les prédictions sont-elles valables? Identifier les tests qui peuvent être faits valider le modèle, c'est-à-dire est-il conforme à ses principes et hypothèses?

**Vérifier?** Les prédictions sont-elles bonnes? Identifier les tests qui peuvent être faits pour vérifier le modèle, c'est-à-dire, est-il utile en termes de raison initiale a été fait?

**Améliorer?** Pouvons-nous améliorer le modèle? Identifier les valeurs de paramètres qui ne sont pas suffisamment connues, les variables qui auraient dû être incluses, et / ou des hypothèses / restrictions qui pourraient être levées. Mettre en œuvre le boucle itératif que nous pouvons appeler «modèle-valider-vérifier-améliorer-prévoir».

**Utilisation?** Comment allons-nous exercer le modèle? Que ferons-nous avec ce modèle?



**Figure I.1** : Vue de premier ordre de la modélisation mathématique qui montre comment les questions posées dans une approche de construction fondée sur des principes un modèle se rapportent au développement de ce modèle

### I.2.4. Multiplicité des modélisations

Même lorsque le but est fixé, il y a souvent plusieurs modèles possibles dont chacun présente des avantages spécifiques.

« Dans toute modélisation, il y a un choix a priori de l'environnement mathématique servant à décrire l'ensemble des phénomènes. La formulation s'identifie rarement aux manifestations physiques réelles. »

Ainsi en physique, il est commode d'utiliser un espace tridimensionnel euclidien, ou un espace « courbe », ou un espace à 4, 5, 11 ou 26 dimensions, ou un espace de Hilbert, etc. Bien qu'il soit généralement possible de montrer une grande proximité de ces différentes représentations, elles s'avèrent toutefois plus ou moins bien adaptées à la situation considérée. Ces formulations théoriques restent des modèles utiles pour appréhender la réalité, mais ils s'en distinguent. Par exemple, lorsqu'un physicien déclare que « l'univers est en expansion », il faut bien comprendre qu'il affirme implicitement que « par rapport à mon cadre mathématique, tout se passe comme si... ». Un autre physicien peut affirmer que « l'univers n'est pas en expansion » : ils peuvent être parfaitement d'accord si les formulations mathématiques sont distinctes. La même remarque s'applique à d'autres domaines, en particulier aux modèles économiques et comptables dont les résultats et les décisions qui en découlent ont des conséquences économiques et fiscales importantes : l'archétype de la modélisation économique étant le cadastre fiscal et les bases de la taxation immobilière, dont tout le monde sait bien qu'elles sont « fausses », c'est-à-dire qu'elle ne reflètent qu'imparfaitement la valeur réelle qui est censée servir de référence. Tout ceci sans ignorer la réalité : bien qu'un modèle de génie civil pour la construction d'un pont garantisse la robustesse de l'ouvrage, il n'est pas exclu qu'il finisse par s'écrouler (par contre, si le modèle indique que telle variante est trop faible, il serait insensé de la réaliser).

### I.2.5. Typologie de modèle

Selon le sens de la modélisation

La modélisation peut s'exercer

• **Du modèle vers le réel** : ce sont les modèles prédictifs

Ces modèles mathématiques sont utilisés pour anticiper des événements ou des situations, comme prévoir le temps avec la météo, estimer les prix potentiels des actifs financiers avec les modèles

d'évaluation en finance, ou prévenir les épidémies. On parle de modèles prédictifs, dans lesquels des variables connues, dites « explicatives », vont être utilisées pour déterminer des variables inconnues.

• **Du réel vers le modèle** : ce sont les modèles descriptifs

Dans ce cas, les modèles servent à représenter des données historiques. On parle de modèles descriptifs. L'objectif est de rendre compte, de manière interprétable, d'une masse d'informations. L'archétype de ces modèles est la comptabilité : elle décrit de manière simplifiée les événements économiques réels en leur affectant un compte, c'est-à-dire une

« étiquette » censée les caractériser. Ces comptes sont ensuite agrégés pour présenter de manière standard la situation économique des entreprises et des pays.

Les deux types de modèles sont parfaitement liés : une bonne prédiction suppose au moins la prédiction de la situation passée et actuelle, c'est-à-dire une bonne description. Inversement, une bonne description serait parfaitement vaine si elle ne servait pas au moins de diagnostic, ou de carte, pour identifier la conduite à tenir. Un même modèle mathématique peut se trouver applicable à de nombreuses situations, n'ayant pas forcément un rapport évident. Par exemple, des générateurs de paysages sont capables de créer des formes réalistes d'objets aussi différents que des montagnes, des arbres, des rochers, de l'herbe, des coquillages ou des flocons de neige, avec un seul modèle général, alors même que les processus de croissance et de constructions de ses objets sont très divers. Si, au lieu de créer un nouveau modèle, on est capable de rapprocher un problème d'un ancien modèle connu, on obtient immédiatement une masse de données très utile. Une grande partie du travail est donc de reconnaître qu'un modèle connu s'applique, ou à étendre les propriétés connues d'une classe particulièrement utile de modèle (propriété qu'on pourra ensuite utiliser plus largement).

Selon l'efficacité opératoire

Georges Matheron distingue :

- le modèle scientifique panscopique, c'est-à-dire qu'il propose une efficacité opératoire pour tous les objectifs envisageables. Tout énoncé objectif doit y être réfutable.
- le modèle technique polyscopique voire monoscopique, en ce que son efficacité opératoire se résume à un seul objectif.

### I.3. Physique et Mathématiques

Entre Physique et Mathématiques est inscrit dans les cursus scolaires et universitaires un clivage marqué qui est justifié par le fait que Physique et Mathématiques opèrent dans des domaines de recherche distincts et font appel à des dispositions intellectuelles différentes. Le physicien s'intéresse aux lois qui gouvernent la matière inerte. Pour "découvrir" ces lois, il utilise des appareillages expérimentaux qu'il a conçus et construits. Comme il use de la symbolique mathématique dans ses calculs, il ne considère, le plus souvent, les mathématiques que comme une "boîte à outils" performante.

De son côté, le mathématicien développe ses recherches dans un univers abstrait, sans relation a priori avec l'univers concret du physicien. Ainsi, certains mathématiciens enveloppent-ils leur discipline d'une aura de "pureté" et la placent au-dessus de toutes les autres disciplines scientifiques.

Le clivage entre Physique et Mathématiques est accentué par le fait que les intuitions du physicien ne sont validées que par le recours à l'expérience tandis que celles du mathématicien ne le sont que par des preuves théoriques rigoureuses. Pourtant, comme l'attestent les travaux de plusieurs chercheurs éminents en Physique et Mathématiques, ces deux disciplines ont entre elles un lien étroit. Einstein, dans son livre *La théorie de la Relativité générale et généralisée, la Relativité et le problème de l'espace*, (Gauthiers-Villars, 1954) écrivait : Comment se fait-il que la mathématique, qui est un produit de la pensée humaine et indépendante de toute expérience, s'adapte de si admirable manière aux objets de la réalité ? La raison humaine serait-elle donc capable, sans avoir recours à l'expérience, de découvrir par son activité seule, les propriétés des objets réels ?

Dans la Préface à son livre intitulé *À la découverte des lois de l'Univers* (Odile Jacob, 2004), Roger Penrose écrit : Dans beaucoup de progrès récents, l'un des éléments essentiels en est l'esthétisme mathématique, sa beauté, sa pertinence et son raffinement. De toute évidence, ces influences mathématiques peuvent se révéler d'une importance capitale, comme ce fut le cas pour la majorité des exploits extraordinaires de la Physique du XX<sup>e</sup> siècle, l'équation de Dirac pour l'électron, la mécanique quantique et la relativité générale d'Einstein. Mais dans tous les cas, ce sont des considérations physiques - émanant en définitive de nos observations - qui définirent les principaux critères pour l'acceptation de ces théories. [6]

## I.4. Informatique et mathématiques

Le développement accéléré de l'informatique, tant sur le plan des appareils que des logiciels, a transformé en profondeur le travail en sciences. Il permet également de transformer l'enseignement des sciences et plus particulièrement des mathématiques. Au niveau du programme de Sciences de la nature, nous sommes donc doublement interpellés. Nous devons d'abord préparer nos élèves à poursuivre des études en sciences au niveau universitaire où l'informatique devient omniprésente. Ensuite, nous devons utiliser les outils informatiques pour améliorer autant que possible l'enseignement des sciences.

Au cégep de Rimouski, depuis quelques années nous avons introduit l'usage des logiciels de calcul symbolique dans l'enseignement des mathématiques en Sciences de la nature. L'utilisation de ces logiciels, plus particulièrement *Maple* et *Mathematica*, nous a permis de développer auprès des élèves une démarche systématique de résolution de problème, la modélisation. Cette démarche utilise les capacités graphiques et les capacités de calcul des logiciels de calcul symbolique pour atteindre un des objectifs importants des mathématiques au niveau collégial : mathématiser des situations concrètes. Cette démarche est une bonne préparation à des études, puis à un travail en sciences alors que l'usage des ordinateurs est de plus en plus associé à la *modélisation* et aux *simulations*. Elle correspond aussi à quelques-uns des objectifs du nouveau programme de Sciences de la nature. [7]

## I.5. Les objectifs pédagogiques

L'objectif principal de la démarche de modélisation est de permettre aux élèves d'acquérir une méthode rigoureuse de résolution de problèmes, la modélisation de phénomènes, correspondant à la démarche scientifique classique. Cette méthode doit leur permettre de ne plus percevoir les mathématiques comme un simple outil de calcul, mais comme le langage permettant de comprendre des phénomènes du monde qui nous entoure. Cette méthode a aussi pour objectif de développer certaines habiletés comme celles d'observer et d'analyser, habiletés nécessaires pour dresser le modèle et pour effectuer des synthèses, pour communiquer et pour rédiger. Elle développe aussi l'habileté à travailler en équipe, le travail de modélisation se faisant en équipe selon des modalités graduelles tout au long des cinq cours. En termes d'attitude, le travail sur les modèles, les simulations et l'évaluation des limites du modèle, développe l'esprit critique. En termes de



connaissances, l'élève est amené à maîtriser des logiciels qu'il utilisera à l'université, et il approfondit, par la visualisation, ses connaissances mathématiques.

La modélisation des phénomènes relevant d'autres disciplines (physique, biologie...) favorise le transfert des connaissances et l'autonomie dans le travail. La modélisation est une forme d'apprentissage par problèmes.

La démarche de modélisation est enseignée, puis utilisée dans l'ensemble des cours de mathématiques du programme de sciences de la nature. Elle est de plus à la base de l'activité de synthèse de la filière Mathématiques-Physique. Cela suppose une certaine coordination entre les enseignantes et enseignants de mathématiques et aussi au sein du programme de sciences de la nature, comme nous le verrons plus loin.

La démarche de modélisation fait appel aux logiciels de calcul symbolique, comme *Maple*. [8]

## I.6. Comment créer un modèle ?

Il n'est pas question dans un article si court de présenter une méthodologie applicable à toutes les situations (s'il en existe une !), mais quelques points essentiels.

1. Le point de départ est toujours une question qu'on se pose sur une situation future et/ou si complexe qu'on n'y trouve pas la réponse de manière évidente.

Ex. : mon entreprise est-elle viable ? Ce matériel vaut-il le prix demandé ? Ce médicament est-il efficace ? Que faut-il faire pour que la situation s'améliore ?

2. Pour trouver la réponse, il est nécessaire de limiter le champ du problème en recherchant les données qu'on imagine avoir un lien direct avec la question. Trop limiter fait courir le risque de ne pas modéliser un phénomène qui a du poids dans le contexte, mais trop ouvrir entraîne une dispersion des moyens et une accumulation de données non pertinentes qu'il faudra écarter en justifiant les choix. Cette étape est la plus délicate pour la qualité du modèle elle est soumise *a priori* du modélisateur, à ses manques de connaissances parfois de méthode et aux moyens dont il dispose (temps, argent, accès aux données). Au cours de cette étape, on choisit le type de modèle général qu'on va utiliser, notamment en fonction des données dont on pense disposer.

3. Il faut ensuite construire le modèle :

- filtrer les données afin d'en extraire les « bruits », ces irrégularités ou ces événements accessoires qui masquent l'essentiel ;
- éventuellement, reconstituer les manquants, c'est-à-dire les objets qui manquent pour assurer la cohérence de l'ensemble (ex. le fonctionnement d'un paramètre dont on connaît l'existence mais sur lequel on ne dispose pas de données) C'est là qu'interviennent les outils mathématiques et informatiques, qui permettent un filtrage et une construction avec un minimum de subjectivité en un minimum de temps.

4. Le « substrat » restant constitue le modèle, ensemble de règles ou d'équations. Il faut décrire ces règles le plus complètement possible : leur importance relative, les données en entrée et en sortie, les outils mathématiques utilisés, les étapes par lesquelles il faut passer, les points de contrôle.

5. La dernière étape consiste à valider le modèle : en appliquant aux données filtrées les règles du modèle, retrouve-t-on la situation initiale ? Si l'écart est trop important, il est nécessaire de se poser la question des limites que l'on a fixées, ou de la pertinence des outils utilisés pour la modélisation.

Les principaux domaines d'applications

- chimie
- physique
- science de la vie. En agronomie : il existe des applications de la modélisation mathématique pour l'étude des systèmes de culture, des systèmes d'élevage.

Certains travaux de modélisation sont à la base de la création d'outils opérationnels d'aide à la décision pour le conseil agricole.

Les outils mathématiques les plus courants

Il s'agit essentiellement d'outils statistiques et de probabilités, de calculs différentiels (équation aux dérivées partielles et ordinaires). Plus précisément,

- Pour les modèles prédictifs :
  - la projection, qui consiste à prédire la valeur d'une grandeur numérique continue à partir des valeurs passées, par exemple en utilisant les méthodes de régression (linéaire ou non) ;
- Pour tous les modèles :

- la classification supervisée, ou catégorisation, qui permet de situer une observation (événement ou individu) dans un nombre réduit de classes prédéfinies .
- la représentation graphique, qui donne une image visuelle
- l'utilisation des variables centrées, où une variable est censée représenter toutes les autres (ex. la moyenne)
- la corrélation, qui permet d'associer plusieurs variables quand elles ont un comportement commun.
- la clusterisation, ou classification non supervisée, qui consiste à présenter les observations par paquets les plus homogènes possibles (les clusters)
- la réduction de dimensionnalité, qui consiste à créer, à partir d'un ensemble d'observations, un ensemble réduit d'observations (c'est-à-dire moins nombreuses) qui est réputé se comporter comme la population initiale.

## **I.7. Le modèle mathématique dans les nanomatériaux**

Des modèles des matériaux et des outils de simulation sont nécessaires pour éliminer les boucles tâtonnements lors du développement des matériaux, de composants et de processus de fabrication, pour illustrer des scénarios de charge complexes et pour établir des prédictions fiables du comportement des matériaux et des composants existants, ainsi que pour ceux en cours de développement.

Le plus souvent, l'IWM Fraunhofer obtient les propriétés du matériau pertinentes de manière expérimentale, détermine les paramètres de modèle associés et développe des méthodes et des algorithmes. Les propriétés des matériaux sont prédites dans des laboratoires d'essais virtuels, parallèlement à la sécurité et à la durée de vie des composants. La simulation de processus est utilisée pour faire correspondre les paramètres de fabrication et les outils afin de garantir des propriétés optimales aux composants. Le Fraunhofer IWM décrit les comportements correspondants en matière de déformation, d'endommagement, de fracture et de fonctionnement des matériaux et modélise les mécanismes aux échelles macro, micro, méso et nano pour des composants ou des systèmes de matériaux tels que corps solides, fluides, poudres et composites. [9]

La modélisation et la simulation de nanomatériaux assistées par ordinateur permettent de décrire quantitativement la corrélation entre la microstructure du matériau et ses propriétés macroscopiques. Dans cet article, nous proposons une approche intégrée de modélisation, de simulation et de visualisation pour la conception de nanomatériaux. Tout d'abord, une méthode de modélisation paramétrique rapide pour des nanomatériaux importants tels que le graphène, les nanotubes et les MOF est proposée; deuxièmement, le modèle matériel pourrait être édité de manière adaptative sans affecter la validité du modèle sur le plan physique; troisièmement, un calcul préliminaire de l'énergie des nanomatériaux est mis en œuvre sur la base de la théorie de l'ajustement de surface; enfin, un cadre intégré de modélisation, de simulation et de visualisation des nanomatériaux est conçu et mis en œuvre. Les résultats expérimentaux montrent que l'approche proposée est réalisable et efficace

La conception et l'optimisation des matériaux sont des problèmes éternels et nouveaux; presque toute la matière est composée de matériaux. La nanotechnologie émergente, qui modifie la distribution et la disposition des atomes pour obtenir des matériaux de propriétés différentes, a révolutionné la conception des matériaux. De nos jours, les nanotechnologies ont été largement appliquées dans divers domaines tels que le médical, l'aérospatiale et l'énergie. [10]

La modélisation informatique et la simulation de nanomatériaux décrivent de manière quantitative la corrélation entre la microstructure et les macro propriétés des matériaux dans une certaine mesure. La forte puissance de calcul fournie par l'ordinateur permet de surmonter les inconvénients de la conception des matériaux traditionnels et de réduire le cycle de production de matériaux. Au 21ème siècle, la conception assistée par ordinateur joue un rôle important dans la conception des nanomatériaux. Cependant, le logiciel de modélisation de la structure des nanomatériaux et le logiciel de simulation existants posent quelques problèmes. D'une part, les systèmes de modélisation et de simulation ont leurs priorités respectives. Le logiciel de modélisation manque souvent de simulation de matériaux, et le logiciel de simulation manque de modélisation efficace. D'autre part, la modélisation de la structure et la simulation des matériaux font partie intégrante de la recherche sur les matériaux. Les chercheurs ont généralement besoin de transférer des données entre les deux systèmes de manière itérative, ce qui prend du temps. Il est donc essentiel de développer une plate-forme intégrée de modélisation et de simulation des nanomatériaux.

L'objectif principal de la recherche est d'optimiser la conception de la structure du matériau par modélisation et simulation à l'échelle nanométrique. nous proposons une approche intégrée de

modélisation et de simulation pour la conception de nanomatériaux afin d'aider la recherche sur la structure et la macro performance des nanomatériaux.

Actuellement, la modélisation et la simulation des nanomatériaux sont devenues des outils nécessaires pour prédire le mouvement moléculaire. Il existe de nombreux logiciels et programmes commerciaux connexes. Cependant, les logiciels existants ne sont pas assez complets. Certains d'entre eux sont des systèmes de modélisation, les autres sont des logiciels de visualisation. En attendant, ces logiciels sont très coûteux.

## **Chapitre II**

# **Les nanomatériaux en général**

## II) Les nanomatériaux

### II.1. Définition

Nous avons retenu la définition suivante : « Les nanomatériaux : ce sont des matériaux composés de nano-objet (dont la taille est comprise entre 1 et 100 nanomètres) et qui, de par leur taille, présentent des propriétés spécifiques. »

Plus généralement, les nanotechnologies nécessitent la maîtrise de l'infiniment petit. Leur fabrication nécessite des outils et techniques permettant de structurer la matière au niveau atomique, moléculaire, voire supramoléculaire.

En effet, on parle donc ici de matériaux extrêmement petits de l'ordre du nanomètre, c'est-à-dire du milliardième de mètre ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ). Cela est équivalent à 1/100 de la largeur d'une molécule d'ADN ou bien encore 1/50000 de l'épaisseur d'un cheveu humain. La figure 1 ci-dessous permet d'illustrer la taille extrêmement fine d'un nanomatériau. [12]

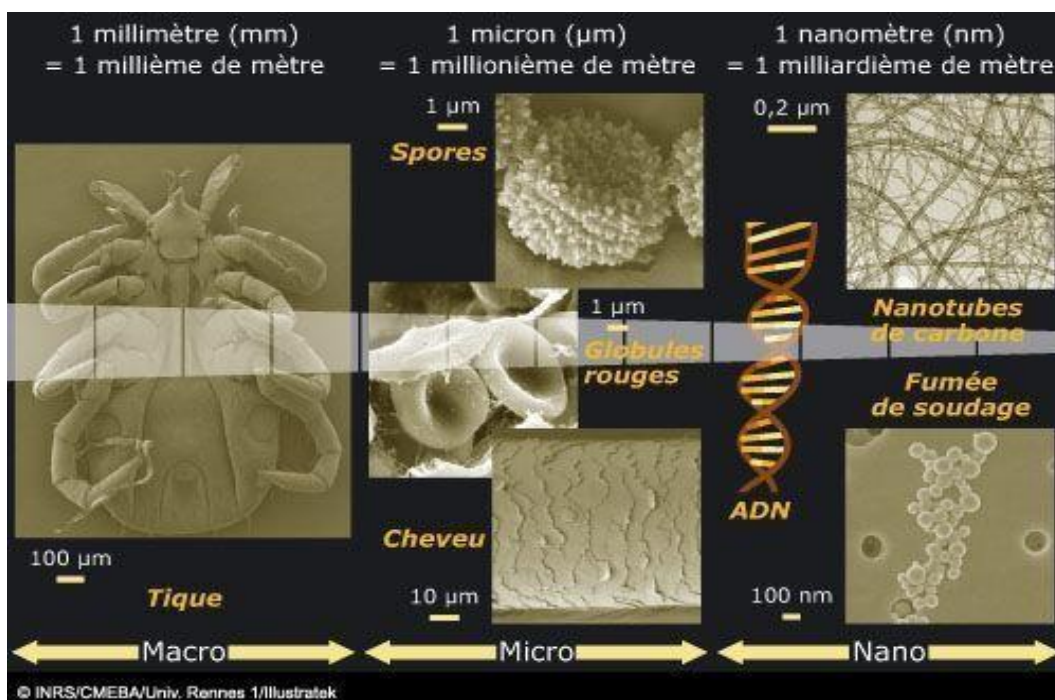


Figure II.1: extrait du dossier les nanomatériaux de l'INRS. [12]

### II.2. Où trouve-t-on les nanomatériaux?

Certains nanomatériaux sont naturels, mais les nanomatériaux manufacturés, conçus pour et déjà utilisés dans de nombreux produits et procédés commerciaux, présentent un intérêt

cosmétiques, les articles de sport, les vêtements résistant aux taches, les pneus, les appareils électroniques, ainsi que dans de nombreux autres articles de la vie quotidienne.

Ils sont utilisés en médecine à des fins de diagnostic, d'imagerie et d'administration de médicaments.

Les nanomatériaux manufacturés sont des ressources conçues au niveau moléculaire (nanomètre) pour tirer parti de leur petite taille et de leurs propriétés nouvelles qui ne sont généralement pas visibles dans leurs homologues classiques en vrac. Les deux principales raisons pour lesquelles les matériaux à l'échelle nanométrique peuvent avoir des propriétés différentes sont l'augmentation de la surface relative et les nouveaux effets quantiques. Les nanomatériaux ont un rapport surface sur volume beaucoup plus grand que leurs formes conventionnelles, ce qui peut conduire à une plus grande réactivité chimique et affecter leur résistance. Également à l'échelle nanométrique, les effets quantiques peuvent devenir beaucoup plus importants pour déterminer les propriétés et les caractéristiques des matériaux, conduisant à de nouveaux comportements optiques, électriques et magnétiques.

Les nanomatériaux sont déjà utilisés commercialement, certains étant disponibles depuis plusieurs années, voire plusieurs décennies. La gamme de produits commerciaux disponibles à ce jour est très large et comprend des textiles résistants aux taches et sans rides, des cosmétiques, des filtres solaires, des produits électroniques, des peintures et des vernis. Les nanomatériaux et les nano composites trouvent des utilisations dans divers produits de consommation, tels que fenêtres, équipement de sport, bicyclettes et automobiles.

Il existe de nouveaux revêtements anti-UV sur les bouteilles en verre qui protègent les boissons des rayons du soleil, et des balles de tennis plus durables utilisant des composites de caoutchouc butyle / nano-argile. Le dioxyde de titane à l'échelle nanométrique, par exemple, trouve des applications dans les cosmétiques, les crèmes solaires et les vitres autonettoyantes, et la silice à l'échelle nanométrique est utilisée comme charge dans une gamme de produits, notamment les cosmétiques et les obturations dentaires. [12]

### II.3. Fabrication

La base de fabrication des nanomatériaux sont les « nano-objets » dont on peut distinguer trois grandes familles :

- 1- Les nanoparticules ou particules ultrafines (PUF) dont aucune dimension n'est supérieure à 100 nanomètres.



- 2- nano-fibres, nanotubes, nano-filaments, et les nano-bâtonnets qui présentent une section de quelques dizaines de nanomètres et une longueur qui varie de 500 à 10 000 nanomètres.
- 3- Les nano-films, les nano-couches et les nano-revêtements, dont au moins deux de leurs dimensions sont supérieures à 100 nanomètres

Pour fabriquer ces nano-objets deux méthodes existent :

Une méthode dite « ascendante » (ou bottom up) :

Cette méthode permet l'assemblage ou le positionnement d'atome ou de molécules de façon précise permettant ainsi la fabrication de matériaux dont la structure est parfaitement maîtrisée. Cette méthode fait appel à des procédés d'élaboration principalement physiques et chimiques.

Une méthode dite « descendante » (ou top down) :

Cette méthode consiste à miniaturiser les systèmes actuels. Les structures sont ainsi graduellement sous dimensionnées jusqu'à atteindre des proportions nanométriques. Cette méthode fait appel à des procédés principalement mécaniques.

Ces nano-objets servent à la fabrication de nanomatériaux qui peuvent être classés en trois catégories :

- 1- Les matériaux nano-chargés ou nano-renforcés. Ils sont élaborés par incorporation de nano-objets dans une matrice organique ou minérale afin d'apporter une nouvelle fonctionnalité ou de modifier des propriétés mécaniques, optiques, magnétiques ou thermiques.
- 2- Les matériaux nano structurés en surface. Ils sont recouverts d'une ou plusieurs couches de nanoparticules qui forment un revêtement bien défini, permettant de doter la surface de propriétés (résistances à l'érosion, hydrophile, etc.) ou de fonctionnalités nouvelles (adhérence, dureté, aspect, etc.)
- 3- Les matériaux nano structurés en volume. Ils possèdent une structure intrinsèque nanométrique (microstructure, porosité, etc.) leur conférant ainsi des propriétés physiques particulières. [12]

## II.4. Utilisations

Aujourd'hui, les nanomatériaux sont présents en masse dans des domaines divers et variés. Le tableau suivant présente les principaux secteurs d'activités dans lesquels on retrouve les nanomatériaux ainsi que quelques exemples d'utilisation actuelle.

Secteur d'activité.	Exemples d'utilisation.
Automobile et aéronautique.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Matériaux renforcés et plus légers.</li> <li>▪ Peintures anti-rayures/salissures/corrosion</li> <li>▪ Aditifs pour diesel permettant une meilleure combustion.</li> <li>▪ Pneumatique plus durable et recyclable.</li> </ul>
Électronique et communication.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Mémoires hautes densités</li> <li>▪ Processeurs miniaturisés.</li> <li>▪ Ordinateurs rapides.</li> <li>▪ Technologies sans fil.</li> <li>▪ Écrans plats</li> </ul>
Chimie et matériaux	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Vitres autonettoyantes</li> <li>▪ Textiles antibactériens et ultra-résistants</li> <li>▪ Isolation thermique</li> </ul>
Pharmacie, biomédicales et biotechnologie	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Médicaments sur mesures délivrés uniquement à des organes précis</li> <li>▪ Régénération des os et tissus</li> </ul>
Cosmétiques	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Crèmes solaires transparentes</li> <li>▪ Rouge à lèvres meilleure tenue</li> </ul>
Santé	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Destruction de tumeurs par chauffages</li> <li>▪ Thérapie génique : nano vecteurs pour transfert de gènes</li> <li>▪ Microchirurgie : nano-implants et prothèses</li> </ul>
Énergie	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Nouveaux types de batterie</li> <li>▪ Photosynthèse artificielle</li> </ul>
Environnement et écologie	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Diminution des émissions de dioxyde de carbone</li> <li>▪ Production d'eau ultra-pure à partir d'eau de mer</li> <li>▪ Pesticides plus efficaces et moins dommageables</li> </ul>
Défense	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Systèmes de surveillance miniaturisés</li> <li>▪ Système de guidage plus précis</li> </ul>

**Tableau II.1** : les principaux secteurs utilisant les nanomatériaux et exemples [12]

## II.5. Les risques liés à l'utilisation des nanomatériaux

### - Polémiques autour des nanomatériaux

Aujourd'hui dans l'actualité les nanomatériaux sont de plus en plus décriés, alors qu'ils sont en train de devenir incontournables dans notre quotidien grâce à leurs propriétés intrinsèques, de nombreux scientifiques et associations s'élèvent pour mettre en garde les utilisateurs et les consommateurs sur les risques potentiels engendrés par les nanomatériaux. Et se heurtent aux lobbies des industries utilisatrices de ceux-ci.

À l'heure actuelle aucune étude sérieuse n'a été menée sur l'impact des nanomatériaux sur l'homme et sur l'environnement. Malgré tout, un certain nombre d'entre eux sont accusé d'être à l'origine de maladies, c'est le cas des nanotubes de carbone qui de par leur forme (allongée et cylindrique) sont comparées aux fibres d'amiante, dont il a été prouvé que leur petite taille et leur forme leur permettaient de pénétrer profondément dans les poumons et de développer des tumeurs cancéreuses.

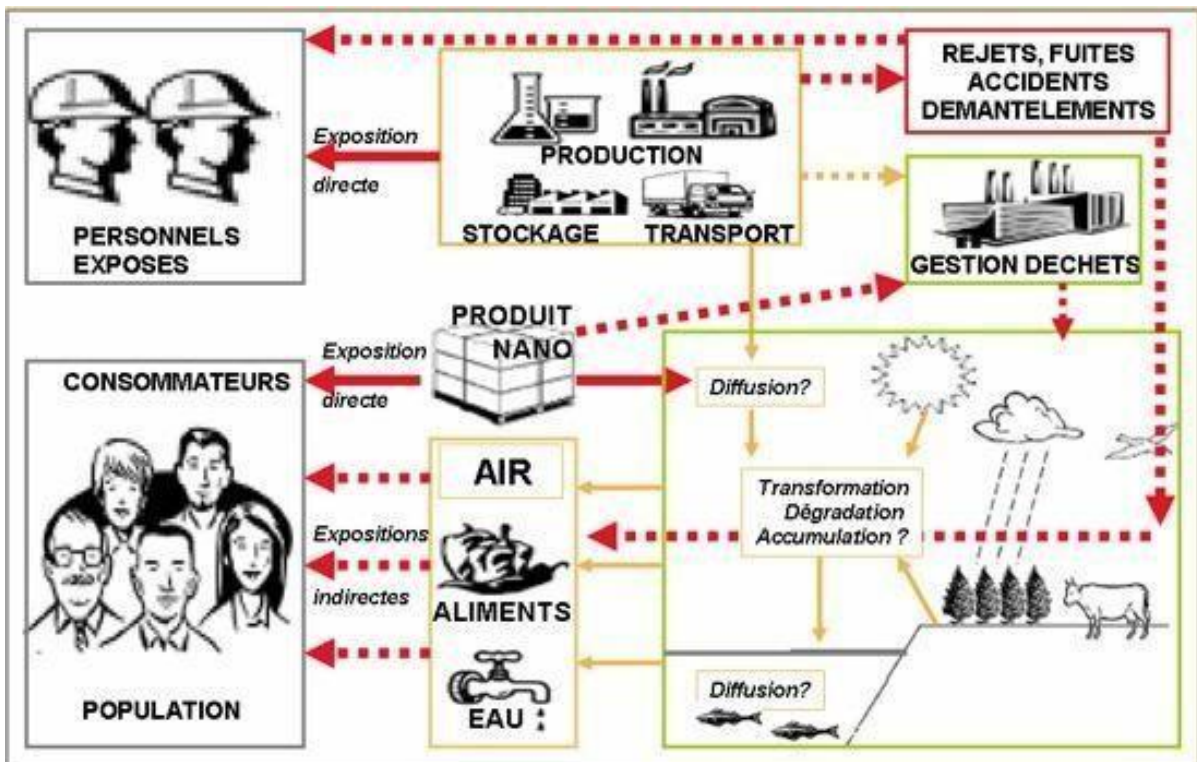


Figure. II.2 : cycle des nanomatériaux de la production à l'exposition des personnes. [12]

La figure précédente (figure II.2) présente le cycle des nanomatériaux, de leur production à l'exposition des personnes, en passant par leur diffusion dans l'environnement.

En ce qui concerne l'exposition des personnes aux nanomatériaux, les opérateurs des industries qui utilisent les nanomatériaux ne sont pas les seuls à être susceptibles d'être exposés aux nanomatériaux. Les consommateurs de produits à base de nanomatériaux peuvent aussi être confrontés aux nanomatériaux, mais aussi plus indirectement l'ensemble de la population.

Les nanomatériaux peuvent aussi avoir un impact plus global sur l'environnement, on distingue alors :

1. Exposition directe, cela concerne les opérateurs des entreprises qui utilisent des nanomatériaux (lors des phases de production, de stockage, ou de transport) ainsi que les consommateurs de ces produits.
2. Exposition indirecte, cela concerne l'ensemble de la population. En effet, la phase de production des nanomatériaux peut être à l'origine de rejet dans l'environnement. Qui par infiltration dans les sols, dans l'eau et par la diffusion dans l'air vont pouvoir pénétrer dans l'organisme humain. [12]

# **Chapitre III**

## **Les nanotubes de carbone**

### **III) Les nanotubes de carbone**

Les nanotubes de carbone suscitent un intérêt considérable dans le monde de la recherche, comme dans celui de l'industrie, compte tenu de leurs propriétés intrinsèques exceptionnelles et de leurs caractéristiques dimensionnelles. Bien que leur existence soit déjà connue du grand public en raison des multiples applications prometteuses, les dangers pour la santé des nanotubes de carbone n'ont été que peu étudiés. Les publications existantes, parfois extrêmement sommaires, ne dévoilent que des données insuffisantes pour évaluer les risques encourus suite à une exposition aux nanotubes de carbone. Or, compte tenu de l'engouement suscité par ces nouvelles substances chimiques, le nombre de travailleurs exposés devrait s'accroître au cours des prochaines années. Il s'avère donc nécessaire de faire un point sur les caractéristiques et les applications des nanotubes de carbone, sur les connaissances toxicologiques actuelles et sur les moyens de prévention à mettre en œuvre lors de leur manipulation. Il est recommandé, jusqu'à ce que l'importance des expositions professionnelles et les risques sur la santé humaine correspondants soient mieux connus et évalués, d'appliquer le principe de précaution et de rechercher le niveau d'exposition le plus bas possible.

#### **III.1. Les formes allotropiques du carbone**

Le carbone est le quatrième élément le plus abondant dans le système solaire et le sixième plus abondant dans l'univers, bien qu'il ne soit que dixième au niveau de l'abondance terrestre. Il existe dans la croûte terrestre à la teneur moyenne de 180 ppm, la plupart du temps sous forme de composés, et dans l'atmosphère, sous forme de CO<sub>2</sub>, CO et de méthane.

Les nanotubes de carbone suscitent l'intérêt du monde de la recherche et de l'industrie en raison de leurs propriétés intrinsèques et de leurs caractéristiques dimensionnelles exceptionnelles. Les risques pour la santé des nanotubes ont été peu étudiés, même si le grand public est déjà au courant de leur existence en raison de leurs nombreuses applications promotionnelles. Les publications existantes, parfois extrêmement brèves, ne révèlent que des données insuffisantes pour évaluer les risques liés à l'exposition aux nanotubes de carbone. Cependant, le grand intérêt suscité par ces nouveaux produits chimiques indiquerait clairement que le nombre de travailleurs exposés diminuera.

### III.1.1. Les différentes variétés allotropiques du carbone

#### III.1.1.a. Le graphite

Le graphite est un solide noir de structure hexagonale comme représenté sur la Figure III.1. Les plans, dits plans graphènes, sont empilés suivant un mode ABAB, avec une distance entre plans de 3,35 Å. Ces plans n'interagissent entre eux que par des forces van der Waals attractives. Comme ces forces sont relativement faibles, les plans graphènes peuvent glisser les uns sur les autres. A l'intérieur d'un plan la longueur de la liaison C-C est de 1,415 Å. [14]

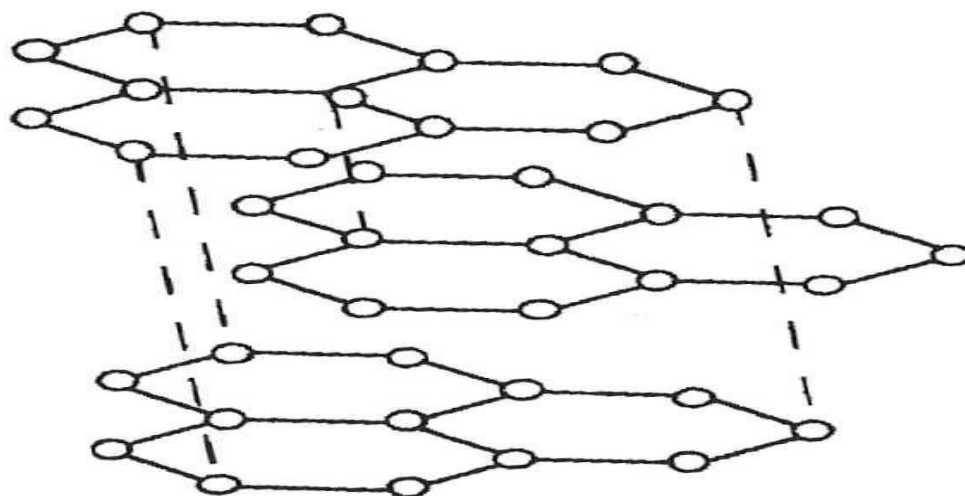


Figure. III. 1 : Structure du graphite. [14]

#### III.1.1.b. Le diamant

Le diamant est la forme allotropique ne comportant **que des carbones  $sp^3$** . Il consiste en des atomes liés comme indiqués sur la Figure. III.2. Les liaisons C—C ont pour longueur 1,514 Å. Le diamant est thermodynamiquement instable par rapport au graphite (la différence d'enthalpies libres est de 2,88 kJ.mol<sup>-1</sup>), mais la transformation diamant → graphite est extrêmement lente en conditions standards. Il y a principalement trois sortes de diamant : naturel, synthétique et fabriqué par CVD. [14]

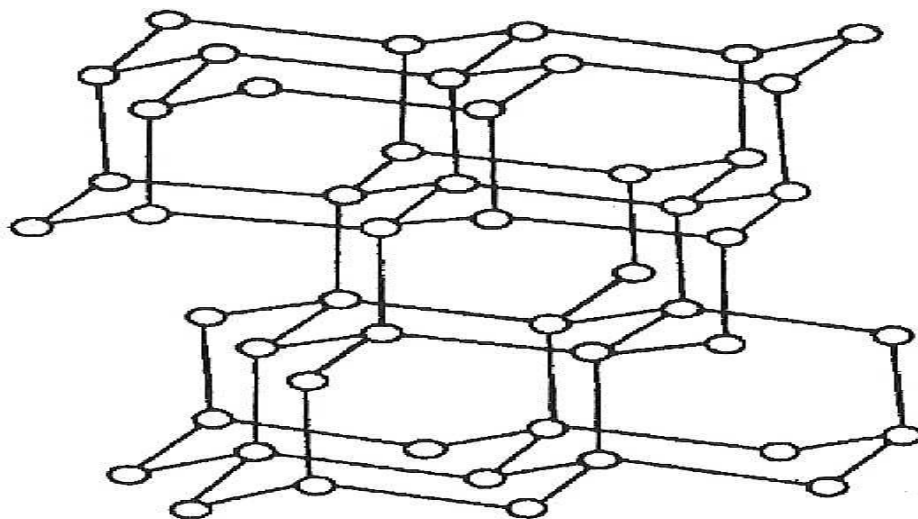


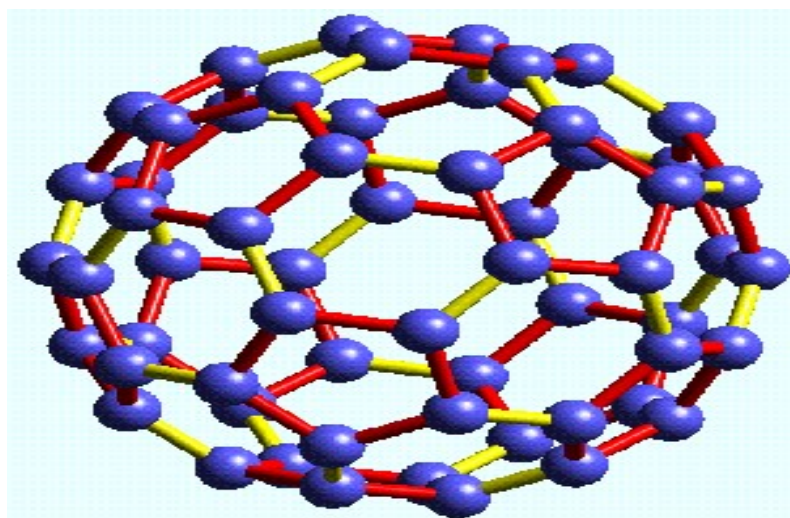
Figure. III.2 : Structure du diamant [14]

### III.1.1.c. Les fullerènes

Considérons le graphite, phase thermodynamiquement stable du carbone : chacun de ses plans graphène possède un très grand nombre, disons une infinité, d'atomes de carbone. Si l'on réduit beaucoup ce nombre d'atomes, le nombre de liaisons pendantes sur les bords d'un plan graphène devient élevé : la structure doit alors « se refermer » sur elle-même. Si le nombre de carbones est inférieur à quelques centaines, les structures stables sont fermées : il s'agit des fullerènes, de formule brute  $C_{2n}$ . En conséquence directe du théorème d'Euler, on peut calculer que 12 pentagones sont nécessaires pour donner la courbure permettant à la structure de se refermer sur elle-même.

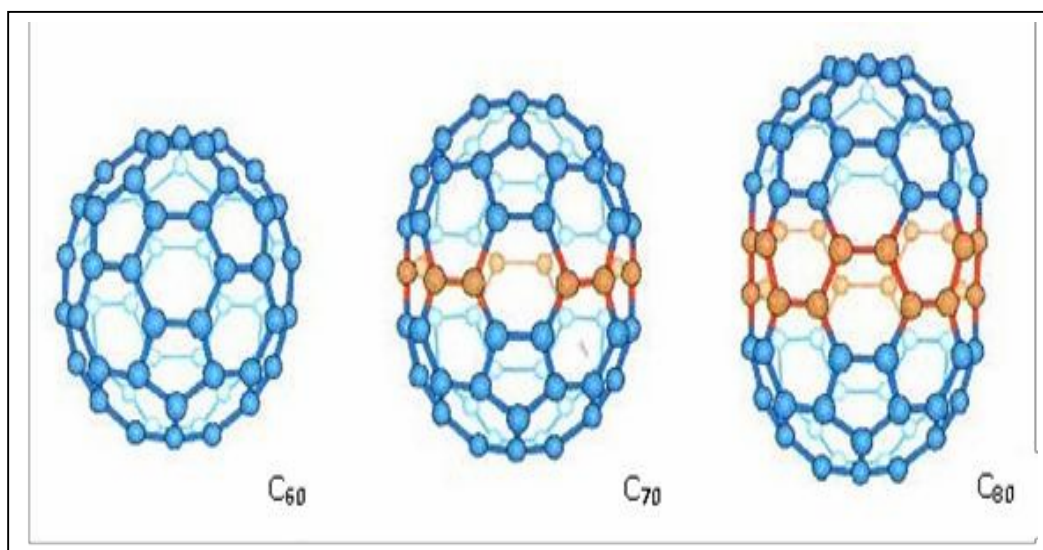
Avec 12 pentagones et 20 hexagones on forme le fameux  $C_{60}$ , ou buckminster fullerène, du nom de Buckminster Fuller (architecte ayant conçu les dômes géodésiques, des structures spatiales offrant un grand volume, pour une résistance et une légèreté inégalées). Ce fullerène est représenté sur la Figure III.3 avec ses deux types de liaisons C-C : celles qui sont communes à deux hexagones sont appelées *liaisons 6-6*, celles qui sont communes à un hexagone et un pentagone sont nommées *liaisons 5-6*. Du fait de la délocalisation électronique des électrons  $\pi$ , les carbones sont tous chimiquement équivalents : un spectre RMN  $^{13}\text{C}$  du  $C_{60}$  en solution ne comporte qu'un seul pic. [15]





**Figure. III.3** : Structure du  $C_{60}$ . Les liaisons C\_\_C communes à un hexagone et un pentagone sont représentées en rouge, les liaisons communes à deux hexagones sont représentées en jaune. [15]

En coupant en deux parties égales le  $C_{60}$  et en ajoutant des atomes de carbone avant de refermer la structure (cf. Figure. III.4.), on peut construire le  $C_{70}$  (25 hexagones, 12 pentagones) et le  $C_{80}$  (30 hexagones, 12 pentagones)



**Figure. III.4** : Du  $C_{60}$  au  $C_{80}$  : les atomes ajoutés au  $C_{60}$  pour obtenir le  $C_{70}$  et le  $C_{80}$  sont représentés en rouge. [15]

En ajoutant encore des carbones, on arrive à un fullerène allongé avec plusieurs centaines à plusieurs millions d'hexagones et 12 pentagones : on obtient un **nanotube de carbone monocouche**. (cf. figure III.5) La Figure III.6 récapitule les différentes formes allotropiques du carbone abordées dans ce paragraphe.

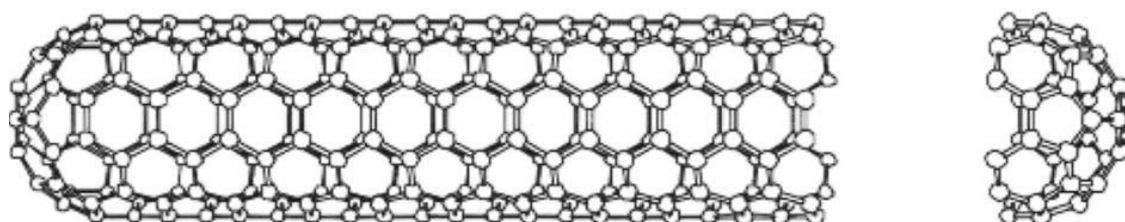


Figure III.5 : Nanotube de carbone monocouche. [15]

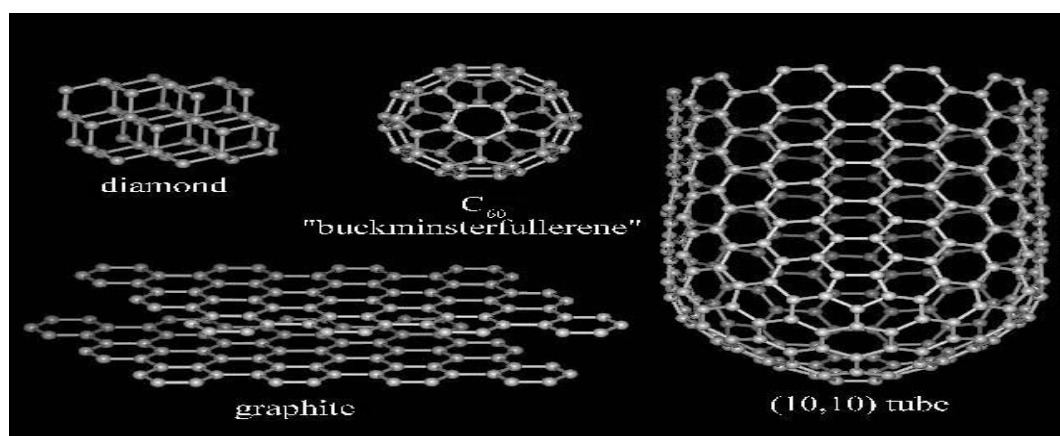
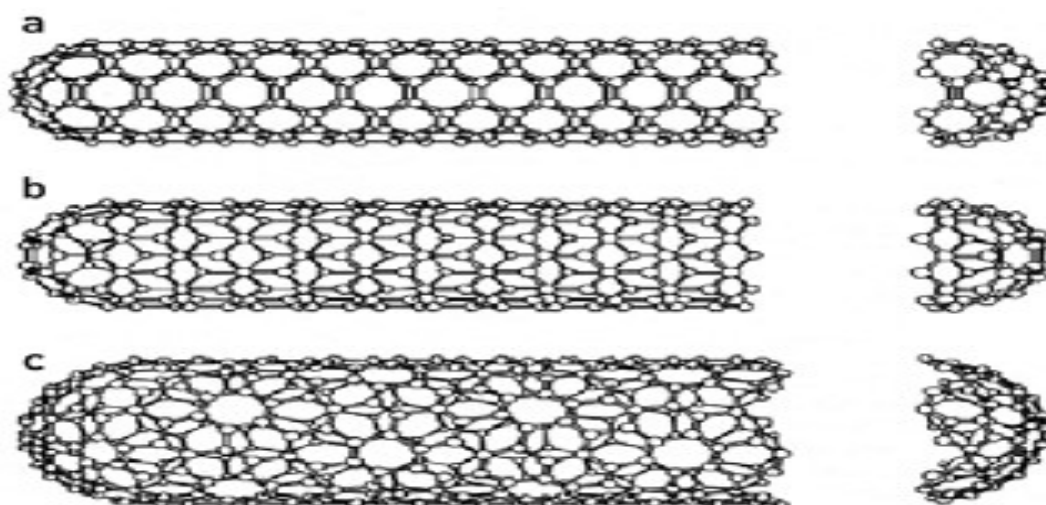


Figure III.6 : Récapitulation des différentes formes allotropiques du carbone abordées dans ce paragraphe. [15]

### III.2. Structure des nanotubes de carbone

nanotube de carbone est composé d'un ou plusieurs feuillets de graphène (i.e. plan graphitique dans lequel les atomes de carbone sont organisés selon un réseau hexagonal à l'image d'un nid d'abeilles) enroulés, suivant rayon de courbure nanométrique, de façon à former une structure cylindrique. L'angle d'enroulement du feuillet de graphène, appelé hélicité ( $\theta$ ), fixe la structure du nanotube. Cet angle varie de 0 à 30° compte tenu de la symétrie du réseau hexagonal et permet de classer toutes les configurations possibles en trois catégories

appelées « chaise », « zig-zag » et « chirale » [16]



**Figure. III.7 :** Les différents modes d'enroulement des nanotubes de carbone [16]

- a.)  $\theta = 30^\circ$ , chaise
- b.)  $\theta = 0^\circ$ , zig-zag
- c.)  $0^\circ < \theta < 30^\circ$ , chirale

Il existe deux types de nanotubes de carbone :

### III.2.a. Les nanotubes monocouches

Comme son nom l'indique, un nanotube monocouche est constitué d'une seul feuillet graphène. L'acronyme **SWNT** (Single-Walled carbon NanoTube) est couramment employé pour les désigner. Les valeurs de diamètres de SWNTs se situent typiquement autour de 1 nm. Les longueurs quant à elles peuvent aller jusqu'à quelques  $\mu\text{m}$ . [17]

Reprenons le « principe de construction » des fullerènes abordé dans le paragraphe

**1.1.3.** : on prend un feuillet graphène fini et on le replie de manière à former un tube, comme schématisé sur la Figure III.8 Le feuillet graphène possède deux types de bord, nommés *armchair* et *zigzag* du fait de leur apparence. Traçons une ligne parallèlement au bord zigzag (cf. Figure III.8 ), replions le feuillet graphène en un rouleau et raccordons ses deux bords armchair de manière à former un tube : on obtient un **nanotube zigzag**. Les hexagones décrivent des cercles perpendiculaires à l'axe du tube.

On peut également prendre un feuillet graphène où le bord long est le bord zigzag (cf. Figure III.9, on conserve notre ligne repère tracée parallèlement au bord zigzag). On replie le feuillet et on raccorde ses deux bords zigzag : on obtient alors un deuxième type de tube, un nanotube armchair. Les hexagones s'alignent parallèlement à l'axe du tube.

On peut enfin effectuer une translation d'un bord du feuillet graphène par rapport à l'autre, parallèlement à l'axe du tube.(cf figure III.10) avant de raccorder les bords pour former le tube. Un nanotube chiral est alors obtenu. La chiralité de cet objet vient du fait que l'on a introduit une hélicité en combinant deux opérations de symétrie : une translation le long de l'axe du tube (le glissement d'un bord du feuillet par rapport à l'autre) combinée à une rotation autour de ce même axe (le raccordement des deux bords). Les hexagones s'enroulent donc autour de l'axe du nanotube de manière hélicoïdale. [17]

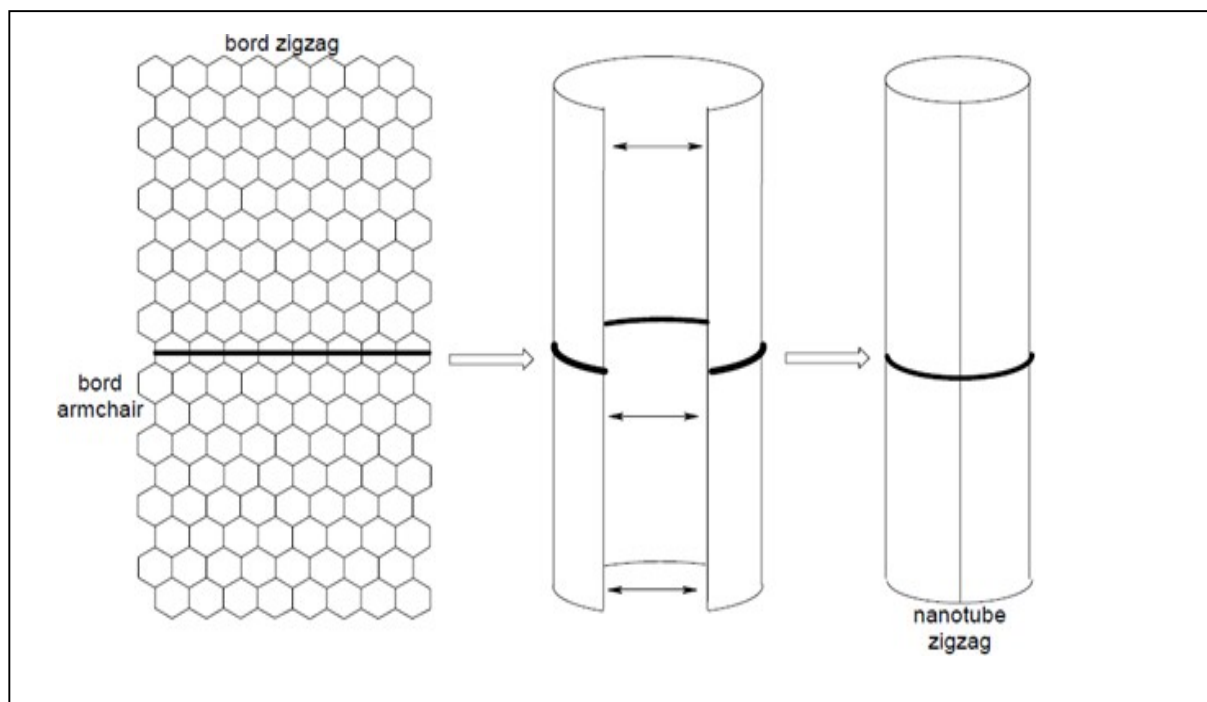


Figure III.8 : Repliement d’un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag. [17]

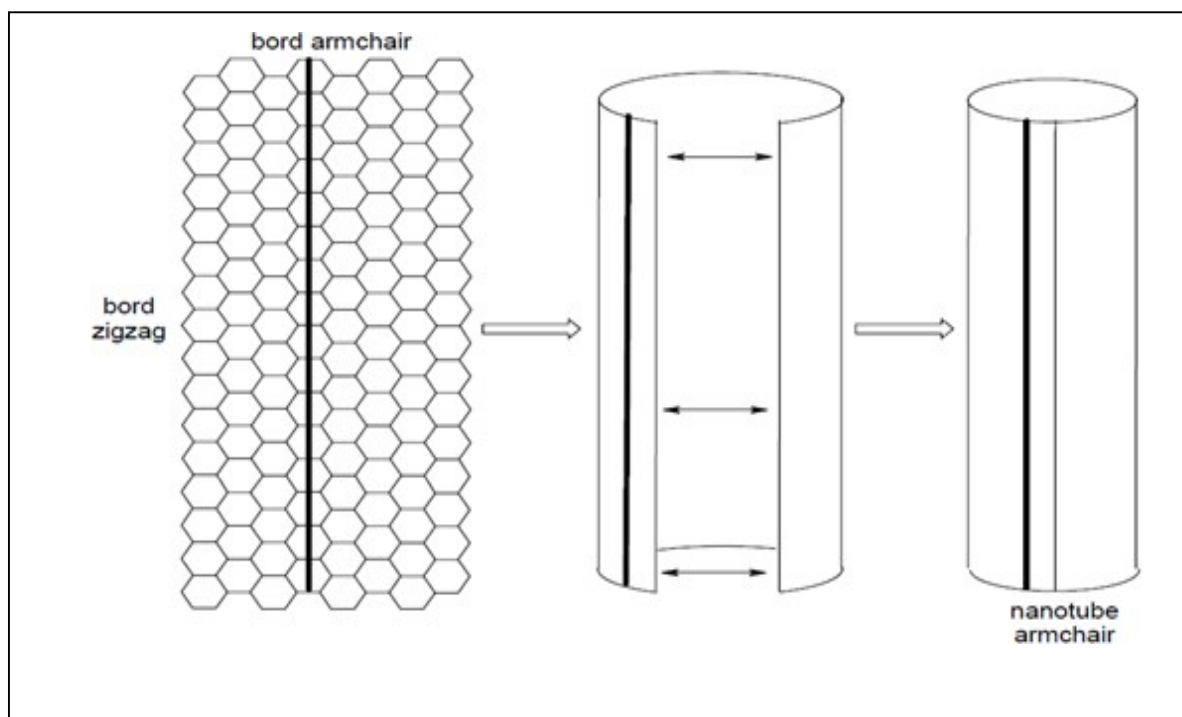
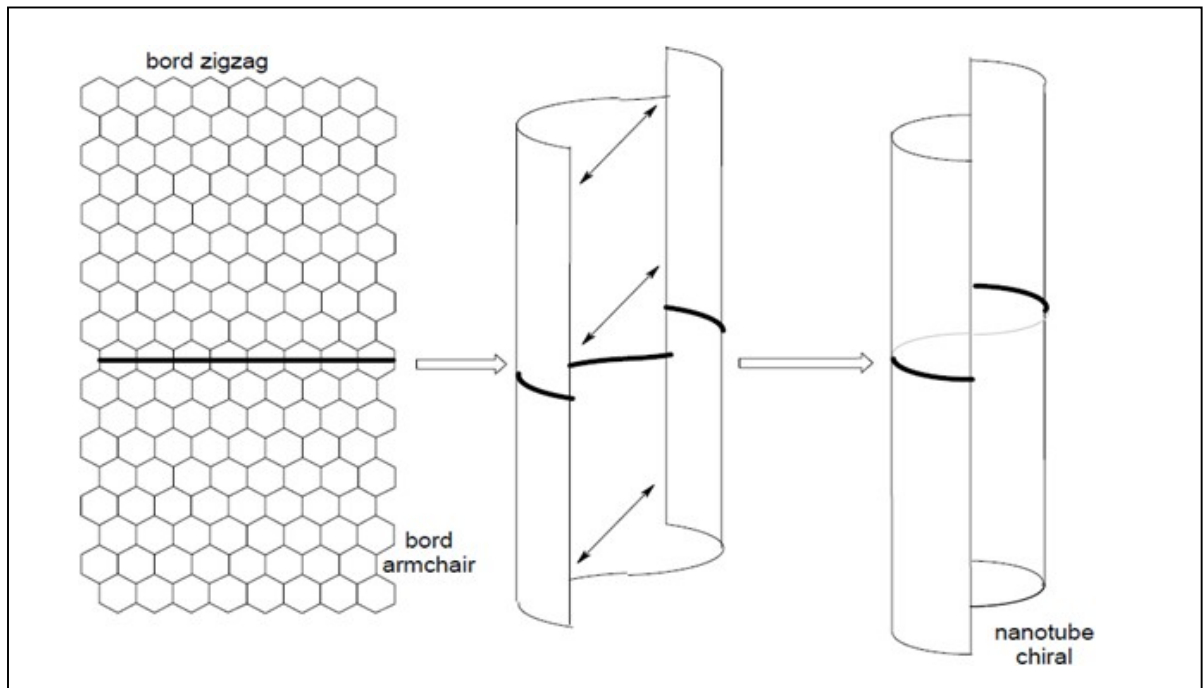


Figure III.9 : Repliement d’un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair. [17]



**Figure III.10** : Repliement d'un feuillet graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral. Cette chiralité provient de son caractère hélicoïdal. [17]

Ces différents type de symétrie ( armchaire, zigzag, chiral) sont caractérisés par l'emploi de deux indices  $(n,m)$ , dits indices de chiralité. Pour cela, on définit une base  $(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$  dans le plan graphène. Prenons un point quelconque O sur la surface du nanotube et faisons le tour du tube dans un plan perpendiculaire à son axe de manière à revenir à notre point de départ ( trajet  $O \rightarrow M$ , cf. figure III.11). Pour définir la symétrie de l'enroulement du feuillet graphène autour de l'axe, il suffit alors de décomposer le vecteur  $OM = \vec{c}_h$  dans la base précédemment définie :

$$\vec{c}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$$

où  $n$  et  $m$  sont des entiers. Il s'agit des indices de chiralité.

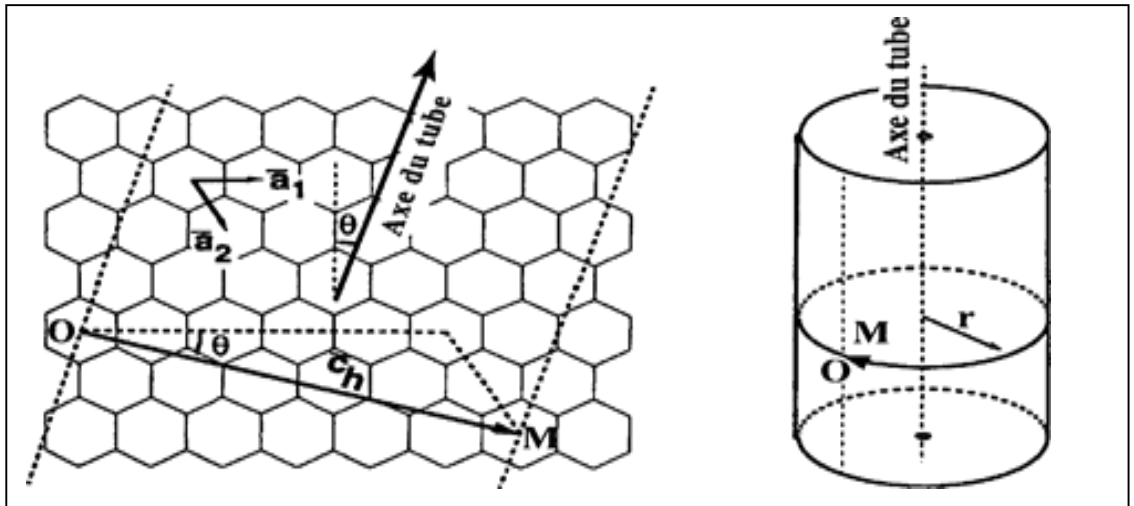


Figure III.11 : Représentation du vecteur  $\vec{c}_h$  définissant l'enroulement du feuillet graphitique autour de l'axe du nanotube de chiralité  $(n,m)$ . Par construction, le vecteur  $\vec{OM} = \vec{c}_h$  est perpendiculaire à l'axe du tube.

### III.2.b. Les nanotubes de carbone multicouches

Les nanotubes multicouches (ou MWNT, *Multi Walled carbon NanoTube*) sont constitués de plusieurs tubes concentriques n'ayant pas la même chiralité, créant ainsi une **structure turbostratique**. En effet, on appelle graphite turbostratique un empilement désordonné de plans graphènes. La distance entre les couches dans les MWNTs est de l'ordre de 3,4 Å, ce qui est proche de la distance inter-plans dans le graphite.

Les nanotubes multicouches ont un diamètre variant bien entendu avec le nombre de feuillets : entre 2 et 25 nm, pour une longueur allant de 20 à 80 µm. [17]

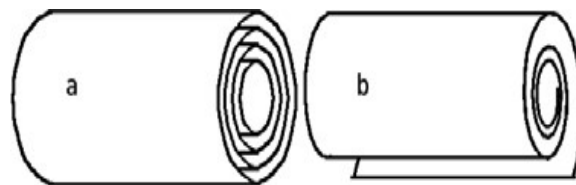


Figure III.12 : Nanotubes de carbone multi feuillets Multi wall carbone nanotubes [18]

- Formé de feuillets de graphène arrangés en cylindres concentriques.
- Constitué d'un feuillet de graphène enroulé en spirale

### III.3. Fabrication, Propriétés et applications

#### III.3.1. Fabrication

##### III.3.1.1. Les méthodes de synthèse

Il existe deux grandes familles de méthodes pour l'élaboration des nanotubes de carbone. La première voie, nommée voie de synthèse à haute température, consiste à sublimer le carbone graphite et à le condenser dans une enceinte mise sous atmosphère inerte (sous hélium ou argon) et dans laquelle règne une température élevée (le graphite se sublime à une température de 3200°C). Les différentes méthodes utilisant ce principe se distinguent par le procédé de sublimation du graphite mis en œuvre : [16]

#### 1. Arc électrique

Dans le procédé de Krätchmer et Huffman, historiquement utilisé par S. Iijima, un arc électrique est établi entre deux électrodes de graphite. L'anode se consume pour former un plasma dont la température peut atteindre 6 000°C. Ce plasma se condense sur l'autre électrode, la cathode, en un dépôt caoutchouteux et filamenteux, évoquant une toile d'araignée très dense et contenant les nanotubes. Ce procédé est simple et peu coûteux mais les processus qui se déroulent lors de la synthèse sont complexes, ce qui rend délicat leur contrôle et leur étude *in situ*. [16]

#### 2. Ablation laser

Cette technique, développée initialement par le groupe de R. Smalley à l'Université de Houston (USA), consiste à bombarder une cible de graphite avec un rayonnement laser de forte énergie. Les conditions de synthèse et la nature des nanotubes varient selon que le laser est continu ou pulsé. Le graphite est ainsi soit sublimé soit expulsé en petits agrégats de quelques atomes. Contrairement au précédent, ce procédé est coûteux mais présente un rendement de synthèse plus important et un nombre restreint de paramètres de contrôle, ce qui rend possible l'étude des conditions de synthèse et leur modélisation. [16]

#### 3. Réacteur solaire

Cette méthode consiste, pour sublimer le graphite, à utiliser l'énergie solaire. Le rayonnement solaire est ainsi concentré sur une cible de façon à atteindre la température de sublimation du graphite. Le mode de fonctionnement du four solaire est voisin de celui de la sublimation par laser continu et il est donc, comme ce dernier, adapté à des études *in situ*.



Tous ces procédés permettent la synthèse de produits très purs que ce soit des nanotubes de carbone mono- feuillet ou multi-feuillets. Cependant, la présence d'un catalyseur métallique mélangé à hauteur de quelques pour cents à la poudre de graphite est indispensable pour la formation de nanotubes mono-feuillet. Ce catalyseur peut être un métal de transition (fer, cobalt, nickel, etc.), un métal appartenant à la famille des terres rares (yttrium, lanthane, etc.) ou un mélange de ces métaux. Une expérience peut conduire à l'élaboration de quelques centaines de milligrammes à un gramme de nanotubes bruts (c'est-à-dire non purifiés) en laboratoire. Bien qu'il soit difficile d'extrapoler ces méthodes à un niveau industriel, des unités de production à une échelle dépassant celle du laboratoire se développent.[16]

### III.3.2. Les propriétés

Les propriétés uniques des nanotubes de carbone résultent directement de leur filiation structurale avec le graphite, de leur forme tubulaire et de leur diamètre nanométrique. Le procédé de synthèse et la méthode de purification utilisés influent également très fortement sur les propriétés physicochimiques des nanotubes de carbone.

#### III.3.2.1. les propriétés physiques

Le diamètre des nanotubes de carbone dépend naturellement du nombre de feuillets de graphène comme indiqué dans le Tableau III.1

Les nanotubes de carbone mono- feuillet se regroupent sous forme de fagots dont le diamètre peut varier de 10 à 30 nm. [18]

Nanotube de carbone	Mono-feuillet	Multi-feuillets
Diamètre externe	0,4 à 3 nm	2 à 25 nm
Longueur	1 à plusieurs $\mu\text{m}$	1 $\mu\text{m}$ à 1 cm

Tableau III.1 : Les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone [18]

##### III.3.2.1.1. Propriétés mécaniques

Le nanotube de carbone bénéficie d'une tenue mécanique supérieure à celle du graphite : le module d'Young d'un nanotube multi-feuillets a été calculé comme étant jusqu'à 1,6 fois plus important que celui d'une fibre mono cristalline (ou whiskers) de graphite (cf. Tableau III.2).

De plus, le nanotube de carbone est 100 à 200 fois plus résistant que l'acier pour un poids 6 fois moindre à section équivalente). Il allie à cette exceptionnelle résistance à La force des liaisons C-C confère aux nanotubes des propriétés mécaniques exceptionnelles.

Des calculs théoriques prédirent tout d'abord ces propriétés : des valeurs de 1 à 5 TPa furent calculées pour le module d'Young axial de SWNTs (des valeurs comparables à celle du module d'Young tangentiel pour un feuillet graphène).[20] Les premières valeurs expérimentales du module d'Young ont été estimées sur des nanotubes multicouches isolés, par la mesure de leurs vibrations intrinsèques thermiques en microscopie électronique à transmission. Elles sont de l'ordre du Tpa, avec une moyenne estimée à 1,8 Tpa [21] , mais avec des valeurs pouvant atteindre 4 Tpa. D'autres mesures furent réalisées, en utilisant cette fois ci la microscopie à force atomique. Elles donnèrent des valeurs de 1,3 Tpa pour des MWNTs [22] et de 1,0 Tpa pour des SWNTs [23]

Les nanotubes peuvent subir en tension des déformations extrêmes (jusque 10 % - 20 %) [24] sans montrer de signes de déformation plastique ou de rupture fragile. La forte capacité des nanotubes à subir des déformations réversibles est due à la flexibilité du feuillet graphène, à la possibilité qu'ont les atomes de carbone de se réhybrider avec un degré d'hybridation  $sp^2/sp^3$  dépendant de la contrainte. Ces réhybridations permettent, lors de l'application d'une contrainte, la propagation des défauts dans les réseaux graphènes des parois. [25]

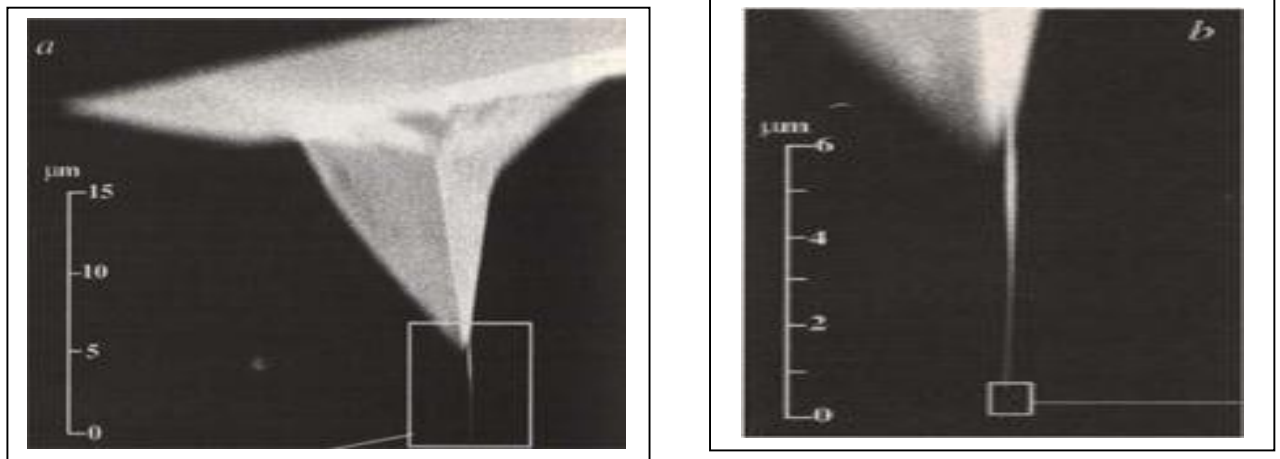
Notons enfin que la compression de nanotubes monocouches conduit à une réduction de volume exceptionnellement grande et réversible. La densité augmente rapidement avec la pression, jusqu'à approcher celle du graphite, et retrouve sa valeur initiale après l'arrêt de l'application de la pression. <sup>125</sup> Cette capacité des SWNTs à absorber réversiblement de l'énergie mécanique a été attribuée à un changement de forme réversible de la section transversale des tubes, passant de circulaire à elliptique et vice-versa

Nanotube de carbone Propriétés	Mono-feuillet	Multi-feuillets
Limite d'élasticité	45 GPa	150 GPa
Module d'Young	1 à 1,4 TPa	1,4 à 1,6 TPa
Module de cisaillement	0,27 TPa	0,44 à 0,47 TPa
Module de flexion	0,2 à 1,2 TPa	3 à 30 GPa

**Tableau III.2 : Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone [18]**

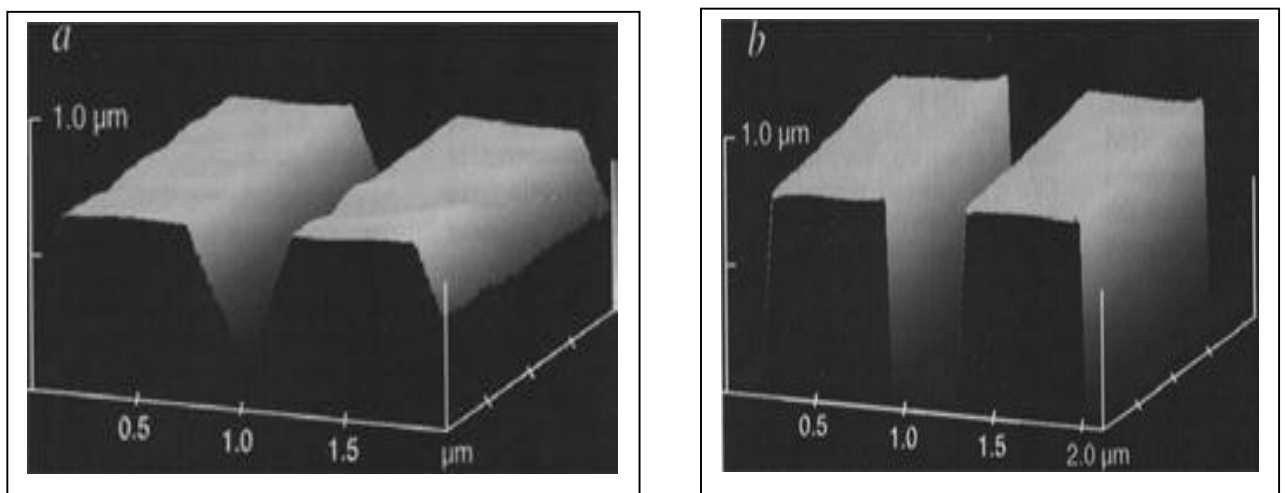
### Applications

1. Les nanotubes de carbone devraient constituer des fibres de renfort idéales pour les matériaux composites. Ils présentent en effet une forte résistance à la traction. En outre, ils ont un rapport longueur/diamètre très élevé (typiquement quelques milliers), tout en étant suffisamment courts pour être coulés à travers les équipements classiques de mise en forme des polymères, autorisant ainsi des formes complexes.
2. La grande élasticité et la forme effilée des nanotubes en ont fait de bonnes pointes pour la microscopie à champ proche. Idéalement, une pointe devrait être aussi précisément définie que l'objet sondé et devrait conserver son intégrité malgré un usage répété, que ce soit sous vide, dans l'eau ou l'air. L'utilisation de nanotubes en tant que pointe de microscope à force atomique permet : i) d'accroître la résolution latérale ; ii) d'augmenter la durée de vie de la pointe (elle résistera mieux aux incidents tels qu'un *crash* sur la surface sondé). La Figure III.13, ainsi que la Figure III.14, sont consacrées à un exemple d'utilisation d'un nanotube multicouche comme pointe AFM [26]



**Figure III.13 : Utilisation d'un nanotube multicouche comme pointe AFM. [26]**

La figure (a) représente l'image MEB d'une pointe classique (en  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ), de forme pyramidale, à l'extrémité de laquelle a été collé un fagot de 5-10 nanotubes multicouches. La figure (b) est un agrandissement de l'encadré de la figure (a) : on y distingue l'extrémité effilée du fagot, qui se termine par un seul MWNT. C'est ce dernier qui constitue la pointe



**Figure III.14 : Images AFM en mode tapping d'une tranchée de 400 nm de large et de 800 nm de profondeur. La figure (a) représente l'image obtenue avec une pointe nue de  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . La forme triangulaire apparente de la tranchée est un artefact dû à la forme pyramidale de la pointe (cf. Annexe C). La figure (b) indique l'image prise avec un MWNT attaché à ce même type de pointe. Ce fin et long nanotube est capable d'atteindre le fond de la tranchée [26]**

### III.3.2.1.2. Propriétés électroniques

En fonction de son angle d'enroulement et de son diamètre, un nanotube de carbone (mono ou multi-feuillets) pourra être soit isolant, soit métallique ou soit semi-conducteur avec un gap équivalent à celui du silicium ou du germanium. Les nanotubes de carbone « chaise » présentent ainsi un caractère métallique, ce qui peut également être le cas sous certaines conditions, des nanotubes « zig-zag » et « chiraux ». À basse température, les nanotubes mono-feuillet métalliques, individuels ou regroupés en petits fagots, se comportent comme des fils quantiques, c'est-à-dire que la conduction a lieu au travers de niveaux électroniques discrets bien séparés quantiquement et cohérents sur plusieurs centaines de nanomètres. Les nanotubes de carbone peuvent également transporter des densités de courant remarquables, voisines de  $10^{10}$  A/cm<sup>2</sup> soit au moins deux ordres de grandeur de plus que les métaux. Enfin, les nanotubes multi-feuillets peuvent être supraconducteurs à très basse température [18]

En ce qui concerne les nanotubes monocouches, les propriétés électroniques sont principalement liées aux deux nombres entiers  $n$  et  $m$  qui définissent l'hélicité du tube ainsi que son diamètre. Les calculs théoriques sur des tubes infinis permettent de recenser les trois cas de figure suivants : [27]

- Les nanotubes de configuration armchair ( $n,n$ ) sont métalliques.
- Les tubes ( $n,m$ ) avec  $n-m$  multiple de 3 non nul sont des semi conducteurs de faible gap.
- Les autres nanotubes sont des semi-conducteurs à gap large ou des isolants.

Plus généralement, on considère que les nanotubes de configuration ( $n,m$ ) sont métalliques si  $n-m$  est un multiple de 3. Dans le cas contraire, ils sont semi-conducteurs. La Figure III.15 résume ces résultats.

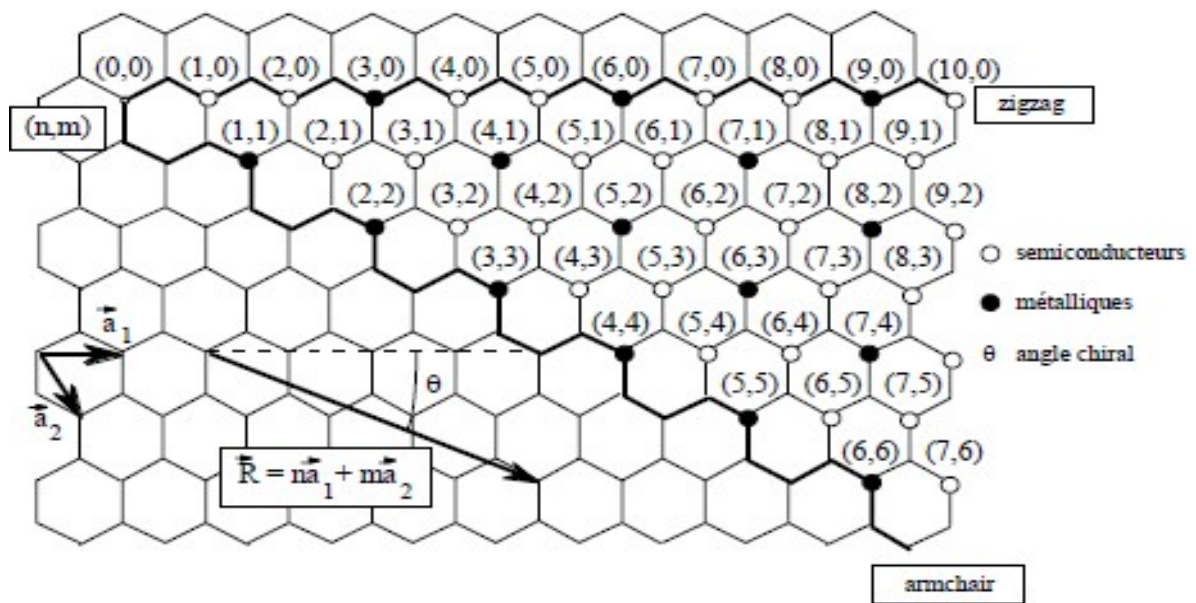


Figure III.15 : Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouches en fonction de leurs indices de chiralité  $(n,m)$ . [27]

### III.3.2.1.3. Propriétés thermiques

Les nanotubes de carbone ont une conductivité thermique supérieure à celle de l'argent, du cuivre et du diamant (entre 1000 et 2600 W/mK) et constituent les meilleurs conducteurs thermiques connus. [18]

Nanotube de carbone Propriétés	Mono-feuillet	Multi-feuillets
Stabilité thermique (K)	< 2100	> 3200
Conductivité thermique (W/mK)	6000	< 2000

Tableau III.3 : Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone [18]

- Les matériaux carbonés et les fibres de graphite sont utilisés industriellement pour améliorer la conductivité thermique. Le diamant et le graphite présentent les plus hautes conductivités thermiques jamais mesurées à température ambiante (la conductivité thermique tangentielle du graphite est  $\approx 3000 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ). C'est pourquoi la découverte des nanotubes en 1991 a rapidement conduit à prédire pour cette nouvelle forme allotropique unidimensionnelle de carbone une conductivité thermique égale ou supérieure à celle du diamant ou du graphite. Les propriétés thermiques de nanotubes, qu'ils soient multicouches ou monocouches, ont encore été relativement peu explorées.

- Des mesures aboutirent à des valeurs de conductivité thermique longitudinale allant de 1800 à 6000  $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour un fagot isolé et à température ambiante. Des valeurs aussi élevées sont imputées à un libre parcours moyen particulièrement élevé pour les phonons (de l'ordre de 100 nm). Une valeur de 6600  $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  fut obtenue pour un nanotube (10,10) isolé et à température ambiante, ce qui est comparable à la conductivité thermique d'un hypothétique feuillet de graphène isolé. [28]

### **Applications :**

Les nanotubes pourraient accroître fortement la conductivité thermique de composites à fibres discontinues. Ces derniers pourraient bénéficier en outre des propriétés mécaniques des tubes. [28]

#### **III.3.2.1.4. Propriétés optiques**

Les nanotubes possèdent des propriétés de limitation optique dans une large gamme de longueurs d'onde, depuis le visible jusqu'au proche infrarouge. Des seuils faibles de non linéarité et de grandes densités optiques ont été obtenues lors de l'étude de dispersions aqueuses de nanotubes monocouches. Ces performances égalent ou surpassent celles d'autres bons limiteurs optiques, comme le  $\text{C}_{60}$  ou le noir de carbone, que ce soit dans le visible ou le proche infrarouge. Les dispersions liquides de nanotubes monocouches apparaissent donc comme des systèmes prometteurs pour une limitation optique à bande large. D'autres solvants ont été essayés, comme l'éthylène glycol ou le chloroforme. Plusieurs phénomènes optiques non linéaires peuvent être à l'origine d'une limitation optique : réfraction, absorption, diffusion. L'origine de la limitation dans le cas des nanotubes est essentiellement une forte diffusion non linéaire engendrée par la formation de bulles de solvant à la surface des nanotubes et par une sublimation des tubes à plus forte fluence. Il est à noter que des MWNTs dispersés dans un film de polymère, en l'occurrence du PMMA, ont montré

également des propriétés de limitation optique large bande. [29]

### **Applications :**

Le développement des sources laser intenses a entraîné la nécessité de concevoir des systèmes de protection pour l'œil et les détecteurs optiques. Les systèmes de protection actifs sont appelés limiteurs optiques. Idéalement, ils transmettent la lumière pour de faibles flux lumineux tandis que pour de forts flux ils limitent la transmission, de manière à maintenir l'intensité en dessous du seuil de dommage du détecteur.

Des études commencent à porter également sur l'utilisation de nanotubes comme détecteur infrarouge. [30]

#### **III.3.2.1.5. Propriétés de forme**

Nous allons aborder séparément les propriétés de forme des nanotubes car ces sont ces dernières qui ont motivé notre étude sur les SWNTs. On peut distinguer plusieurs éléments remarquables dans la morphologie des nanotubes :

- Un nanotube de carbone monocouche constitue une macromolécule hautement anisotrope : avec un diamètre de l'ordre du nm et une longueur de l'ordre du  $\mu\text{m}$ , le rapport d'anisotropie est typiquement de plusieurs milliers.
- Les SWNTs qui ne sont ni armchair ni zigzag sont des molécules chirales.

Les nanotubes possèdent en leur centre un canal lisse, droit et unidimensionnel, que l'on peut voir comme un réservoir nanométrique ou encore comme un moule ou un réacteur.

#### **III.3.2.1.6. Propriétés d'émission de champ**

Les nanotubes de carbone sont capables d'émettre des électrons par effet tunnel via leur pointe lorsqu'ils sont placés parallèlement aux lignes d'un champ électrique. Avec des tensions relativement faibles, il est possible de générer à leurs extrémités des champs électriques colossaux, capables d'arracher les électrons de la matière et de les émettre vers l'extérieur. Cette émission est extrêmement localisée (à l'extrémité du tube) et peut servir à envoyer des électrons sur un endroit bien précis.

L'émission électronique des nanotubes de carbone (assemblés sous forme de films) est de :



- $10^7$  A/cm<sup>2</sup> pour les nanotubes de carbone mono-feuillet,
- de  $10^6$  à  $10^8$  A/cm<sup>2</sup> pour les nanotubes de carbone multi-feuillets [18]

### III.3.2.2. les propriétés chimiques

Les nanotubes de carbone possèdent des propriétés chimiques très attrayantes, Il est en effet possible :

- 1- de fonctionnaliser leur surface par greffage moléculaire afin, par exemple, de procéder au tri des nanotubes selon leurs caractéristiques électroniques
- 2- d'intercaler des atomes ou des molécules (dopage) entre les nanotubes mono-feuillet d'un faisceau (intercalation inter-tubulaire) ainsi qu'entre les différentes parois d'un nanotube multi- feuillets (intercalation inter-planaire) afin par exemple de contrôler les propriétés électroniques des nanotubes semi-conducteurs
- 3- de remplir par capillarité le canal central des nanotubes de carbone mono et multi-feuillets par des atomes ou des composés cristallins de façon à obtenir des nano-fils encapsulés.

La surface spécifique des nanotubes de carbone est de surcroît élevée, ce qui leur confère une très bonne capacité d'adsorption. Elle est voisine de  $2700$  m<sup>2</sup>/g pour les nanotubes mono-feuillet et est généralement inférieure à  $1300$  m<sup>2</sup>/g pour les nanotubes multi- feuillets [18]

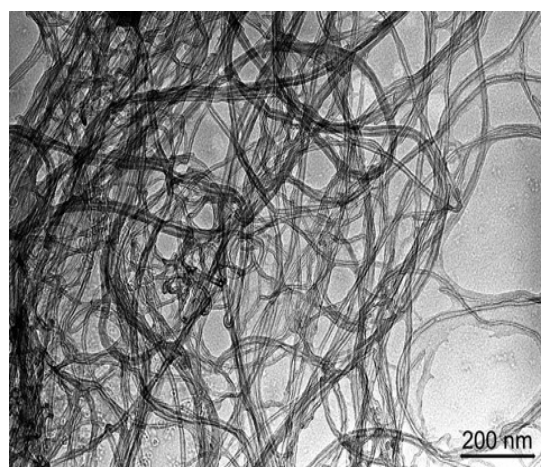
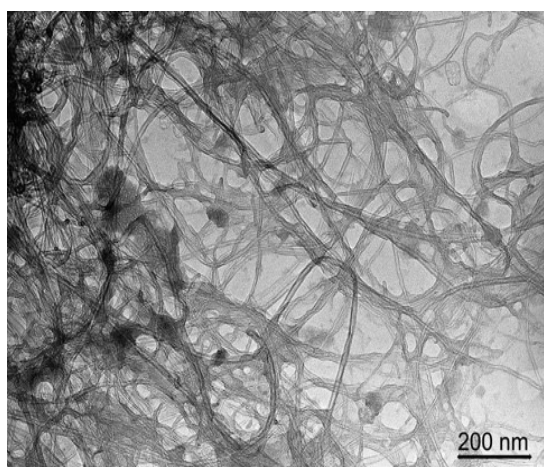


Figure III.(16 , 17) Nanotubes de carbone multi-feuillets observés en microscopie élec [18]

# **Chapitre IV**

## **Résultats et discussions**

SWBNNT**IV.1. Formulations théoriques****IV.1.1. Hypothèses de base**

Le champ de déplacement de la théorie proposée est choisi en fonction des hypothèses suivantes:

- (i) Les déplacements sont faibles par rapport à l'épaisseur du nano faisceau et, par conséquent, les déformations impliquées sont infinitésimales.
- (ii) Le déplacement transversal  $w$  comprend deux composantes de flexion  $w_b$  et de cisaillement  $w_s$ . Ces composants sont uniquement des fonctions de coordonnée  $x$ .

$$w(x, z) = w_b(x) + w_s(x) \quad (1)$$

- (iii) La contrainte normale transversale  $\sigma_z$  est négligeable par rapport aux contraintes dans le plan  $\sigma_x$ .
- (iv) Le déplacement  $u$  dans la direction- $x$  consiste en des composants de flexion et de cisaillement.

$$u = u_b + u_s \quad (2)$$

La composante de flexion  $u_b$  est supposée être similaire au déplacement donné par la théorie classique des faisceaux. Par conséquent, l'expression pour  $u_b$  peut être donnée comme

$$u_b = -z \frac{\partial w_b}{\partial x}, \quad (3)$$

La composante de déplacement due à la déformation en cisaillement ( $u_s$ ) est supposée être de nature parabolique, sinusoïdale, hyperbolique et exponentielle en ce qui concerne les coordonnées d'épaisseur. Ainsi, la composante de cisaillement  $u_s$  engendre, conjointement avec  $w_s$ , des variations de contrainte de cisaillement d'ordre supérieur  $\gamma_{xz}$  et donc une contrainte de cisaillement  $\tau_{xz}$  à travers l'épaisseur du faisceau micrométrique de telle sorte que la contrainte de cisaillement  $\tau_{xz}$  soit nulle sur les faces supérieure et inférieure du faisceau microbille. Par conséquent, l'expression pour  $u_s$  peut être donnée comme

$$u_s = -f(z) \frac{\partial w_s}{\partial x} \quad (4)$$

Les fonctions  $f(z)$  attribuées en fonction de la répartition de la contrainte de cisaillement à travers l'épaisseur de la poutre.

### IV.1.2. Cinématique

Sur la base des hypothèses formulées dans la section précédente, le champ de déplacement peut être obtenu en utilisant des équations d'équation. (1) - (4) comme

$$u(x, z, t) = -z \frac{\partial w_b}{\partial x} - f(z) \frac{\partial w_s}{\partial x} \quad (5a)$$

$$w(x, z, t) = w_b(x, t) + w_s(x, t) \quad (5b)$$

Les déformations associées aux déplacements dans l'équation (5) sont

$$\varepsilon_x = \varepsilon_x^0 + zk_x^b + f(z)k_x^s \quad \text{et} \quad \gamma_{xz} = g(z)\gamma_{xz}^s \quad (6)$$

$$\varepsilon_x^0 = \frac{\partial u_0}{\partial x} ; k_x^b = -\frac{\partial^2 w_b}{\partial x^2} ; k_x^s = -\frac{\partial^2 w_s}{\partial x^2} \quad (7)$$

$$\gamma_{xz}^s = \frac{\partial w_s}{\partial x} ; g(z) = 1 - f'(z) ; \text{et} \quad f'(z) = \frac{df(z)}{dz}$$

### IV.1.3. Relations constitutive

La réponse des matériaux à l'échelle nanométrique est différente de celle de leurs homologues en vrac. L'élasticité non locale est d'abord considérée par Eringen (1983). Il a supposé que la contrainte à un point de référence est une fonction du champ de déformation à chaque point du continuum. Eringen (1983) a proposé une forme différentielle de la relation constitutive non locale comme

$$\sigma_x - \mu \frac{d^2 \sigma_x}{dx^2} = E \varepsilon_x \quad (8a)$$

$$\tau_{xz} - \mu \frac{d^2 \tau_{xz}}{dx^2} = G \gamma_{xz} \quad (8b)$$

Où  $E$  et  $G$  sont le module d'élasticité et le module de cisaillement du nanobeam, respectivement;  $\mu = (e_0 a)^2$  est le paramètre non local,  $e_0$  une constante appropriée à chaque matériau et  $a$  une longueur de caractéristique interne. Le paramètre non local dépend des conditions aux limites, de la chiralité, des formes de mode, du nombre de murs et du type de mouvement (Arash et Wang, 2012). Jusqu'à présent, aucune étude rigoureuse n'a été réalisée sur l'estimation de la valeur du paramètre non local. Il est suggéré que la valeur du paramètre non local puisse être déterminée en comparant les courbes de dispersion issues de la simulation de la mécanique du continuum non local et de la dynamique moléculaire (Arash et Ansari, 2010; Wang et Wang, 2005, 2007). En général, une estimation prudente du paramètre non local est  $e_0 < 2.0$  nm pour un nanotube de carbone à paroi unique (Wang et Wang, 2007).

#### IV.1.4 équations de mouvement

Le principe de Hamilton est utilisé ici pour dériver les équations du mouvement. Le principe peut être énoncé sous forme analytique sous la forme suivante (Reddy, 2002)

$$\delta \int_0^T (U + V - K) dt = 0 \quad (9)$$

Où  $\delta u$  est la variation virtuelle de l'énergie de déformation;  $\delta V$  est la variation virtuelle de l'énergie potentielle; et est  $\delta K$  la variation virtuelle de l'énergie cinétique. La variation de l'énergie de déformation du faisceau peut être définie comme suit:

$$\begin{aligned} \delta U &= \int_0^L \int_A (\sigma_x \delta \varepsilon_x + \tau_{xz} \delta \gamma_{xz}) dA dx \\ &= \int_0^L \left( -M_b \frac{d^2 \delta w_b}{dx^2} + Q \frac{d \delta w_s}{dx} \right) dx \end{aligned} \quad (10)$$

Où  $M_b$  et  $Q$  sont les résultantes de stress définies comme

$$(M_b, M_s) = \int_A (z, f) \sigma_x dA \quad \text{et} \quad Q = \int_A g \tau_{xz} dA \quad (11)$$

La variation de l'énergie potentielle par les charges appliquées peut être écrite comme

$$\delta V = -\int_0^L q \delta(w_b + w_s) dx - \int_0^L N_0 \frac{d(w_b + w_s)}{dx} \frac{d\delta(w_b + w_s)}{dx} dx \quad (12)$$

Où  $q$  et  $N_0$  sont les charges transversales et axiales, respectivement. La variation de l'énergie cinétique peut être exprimée par

$$\begin{aligned} \delta K &= \int_0^L \int_A \rho [u \delta u + w \delta w] d_A dx \quad (13) \\ &= \int_0^L \left\{ I_0 (w_b + w_s) (\delta w_b + \delta w_s) + I_2 \left( \frac{dw_b}{dx} \frac{d\delta w_b}{dx} \right) + k_2 \left( \frac{dw_s}{dx} \frac{d\delta w_s}{dx} \right) + J_2 \left( \frac{dw_b}{dx} \frac{d\delta w_s}{dx} + \frac{dw_s}{dx} \frac{d\delta w_b}{dx} \right) \right\} dx \end{aligned}$$

Où les exposants indiquent la dérivation par rapport au variable temps ( $t$ );  $\rho$  est la masse volumique, et ( $I_0, I_2, J_2, K_2$ ) sont les inerties de masse définies comme

$$(I_0, I_2, j_2, k_2) = \int_A (1, z^2, zf, f^2) \rho dA \quad (14)$$

En substituant les expressions pour  $\delta U$  et  $\delta V$  à partir des équations. (10), (12) et (13) dans l'équation (9) et en intégrant par parties, et en collectant les coefficients de  $\delta w_b$ , et, les équations de mouvement suivantes de la théorie de faisceau proposée sont obtenues

$$\delta w_b = \frac{d^2 M_b}{dx^2} + q - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = I_0 (w_b + w_s) - I_2 \frac{d^2 w_b}{dx^2} - J_2 \frac{d^2 w_s}{dx^2} \quad (5a)$$

$$\delta w_s = \frac{d^2 M_s}{dx^2} + \frac{dQ}{dx} + q - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = I_0 (w_b + w_s) - J_2 \frac{d^2 w_b}{dx^2} - K_2 \frac{d^2 w_s}{dx^2}$$

$$\delta w_b : \frac{d^2 M_b}{dx^2} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (14)$$

$$\delta w_s : \frac{dQ}{dx} - N_0 \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} = 0 \quad (15)$$

lorsque l'effet de déformation en cisaillement est négligé ( $w_s = 0$ ), les équations d'équilibre dans Eq. (15) récupérer ceux dérivés de la théorie des faisceaux d'Euler – Bernoulli.

En substituant Eq. (6) dans Eq. (8) et les résultats ultérieurs dans Eq. (11), les résultantes de stress sont obtenues sous forme

$$M_b - \mu \frac{d^2 M_b}{dx^2} = -D \frac{d^2 w_b}{dx^2} - D_s \frac{d^2 w_s}{dx^2} \quad (16a)$$

$$M_s - \mu \frac{d^2 M_s}{dx^2} = -D_s \frac{d^2 w_b}{dx^2} - H_s \frac{d^2 w_s}{dx^2} \quad (16b)$$

$$Q - \mu \frac{d^2 Q}{dx^2} = A_s \frac{dw_s}{dx} \quad (16c)$$

Où

$$D, D_s, H_s = \int_A (z^2, zf, f^2) EdA, \quad A_s = \int_A g^2 GdA \quad (17)$$

En substituant Eq. (16) dans Eq. (15), les équations de mouvement non locales peuvent être exprimées en termes de déplacements ( $w_b, w_s$ ) comme

$$\begin{aligned} & -D \frac{d^4 w_b}{dx^2} - D_s \frac{d^4 w_s}{dx^4} + q - u \frac{d^2 q}{dx^2} - N_0 \left( \frac{d^2 q}{dx^2} - u \frac{d^4 (w_b + w_s)}{dx^4} \right) \\ & = I_0 \left( (w_b + w_s) - u \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} \right) - I_2 \left( \frac{d^2 w_b}{dx^2} - u \frac{d^4 w_b}{dx^4} \right) - J_2 \left( \frac{d^2 w_s}{dx^2} - u \frac{d^4 w_s}{dx^4} \right) \end{aligned} \quad (18a)$$

Les équations de mouvement de la théorie du faisceau local peuvent être obtenues à partir de l'équation. (18) en définissant le paramètre d'échelle  $\mu$  égal à zéro.

$$\begin{aligned} & -D_s \frac{d^4 w_b}{dx^4} - H_s \frac{d^4 w_s}{dx^4} + A_s \frac{d^2 w_s}{dx^2} + q - u \frac{d^2 q}{dx^2} - N_0 \left( \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} - u \frac{d^4 (w_b + w_s)}{dx^4} \right) \\ & = I_0 \left( (w_b + w_s) - u \frac{d^2 (w_b + w_s)}{dx^2} \right) - J_2 \left( \frac{d^2 w_b}{dx^2} - u \frac{d^4 w_b}{dx^4} \right) - k_2 \left( \frac{d^2 w_s}{dx^2} - u \frac{d^4 w_s}{dx^4} \right) \end{aligned} \quad (18b)$$

#### IV.2.1. Solution analytique de nano poutre simplement appuyée

Dans cette étude, des solutions analytiques sont données pour des nano poutre isotropes simplement supportés pour le pliage, le flambement et la vibration libre.

Les conditions aux limites de nano poutre simplement appuyée sont

$$w_b = w_s = M_b = M_s = 0 \text{ et } x = 0, L$$

Le champ de déplacement suivant satisfait aux conditions aux limites et aux équations directrices.

$$\begin{Bmatrix} w_b \\ w_s \end{Bmatrix} = \sum_{n=1}^{\infty} \begin{Bmatrix} W_{bn} \sin(\alpha x) e^{i\omega t} \\ W_{sn} \sin(\alpha x) e^{i\omega t} \end{Bmatrix} \quad (19-20)$$

Où,  $w_{bn}$  et  $w_{sn}$  sont des paramètres arbitraires à déterminer,  $\omega$  est la fréquence propre associée  $n$  au mode propre, et  $\alpha = n\pi/L$ . La charge transversale  $q$  est également élargie dans la série sinus de Fourier en tant que

$$q(x) = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n \sin \alpha x, \quad Q_n = \frac{2}{L} \int_0^L q(x) \sin(\alpha x) dx \quad (21)$$

Les coefficients de Fourier  $Q_n$  associée à certaines charges typiques sont donnés

$$Q_n = q_0, \quad n = 1 \text{ pour une charge sinusoidal,} \quad (22a)$$

$$Q_n = \frac{4q_0}{n\pi}, \quad n = 1, 3, 5, \dots \text{ pour une charge uniforme} \quad (22b)$$

$$Q_n = \frac{2q_0}{L} \sin \frac{n\pi}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ pour une charge ponctuelle } Q_0 \text{ au plan moyen} \quad (22c)$$

En substituant les expansions de  $w_b$ ,  $w_s$  et  $q$  des équations (20) et (21) dans l'équation (18), les solutions peuvent être obtenues à partir des équations suivantes

$$\left( \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{22} \end{bmatrix} - \lambda N_0 \alpha^2 \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{Bmatrix} W_{bn} \\ W_{sn} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (23)$$

Où

$$S_{11} = D\alpha^4, \quad S_{12} = 0, \quad S_{22} = A_s \alpha^2, \quad \lambda = 1 + \mu \alpha^2 \quad (24)$$

#### IV.2.2. Flambage

La charge de flambement est obtenue à partir de l'équation. (23).

$$N_0 = \frac{S_{11} S_{22}}{\lambda \alpha^2 (S_{11} + S_{22})} \quad (25)$$



$$N_0 = -\frac{E\beta TA}{1-2\nu} \tag{26}$$

$$P_{cr} = \beta \frac{AL^2}{I} T \tag{27}$$

.../...

numéro de mode

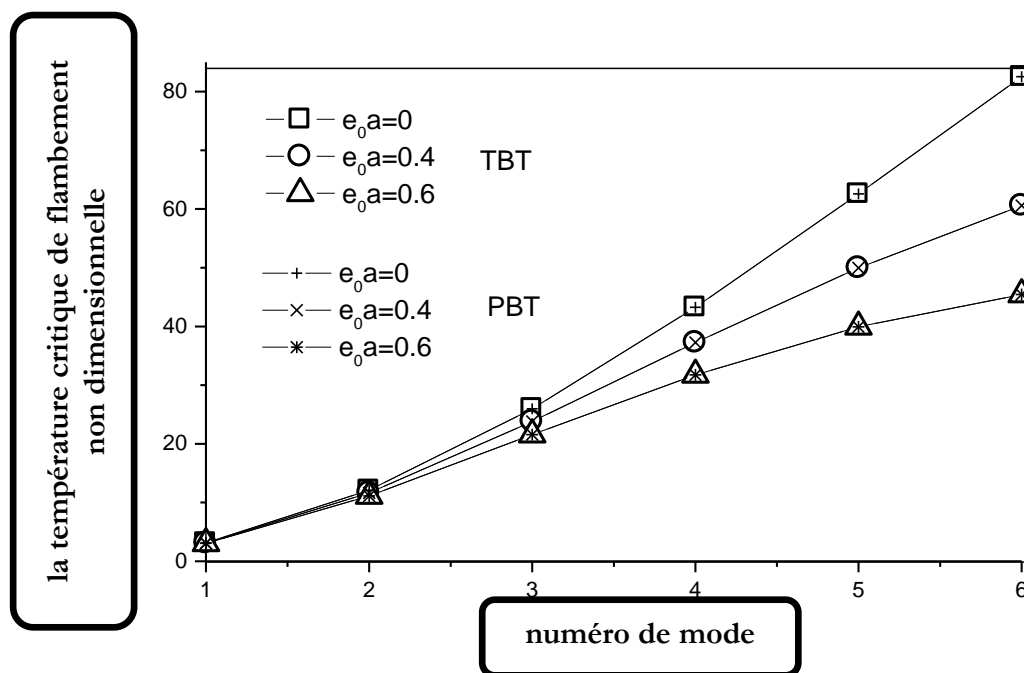


Fig IV.1 :.Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle et le numéro de mode avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). La valeur de  $L / d$  est 20

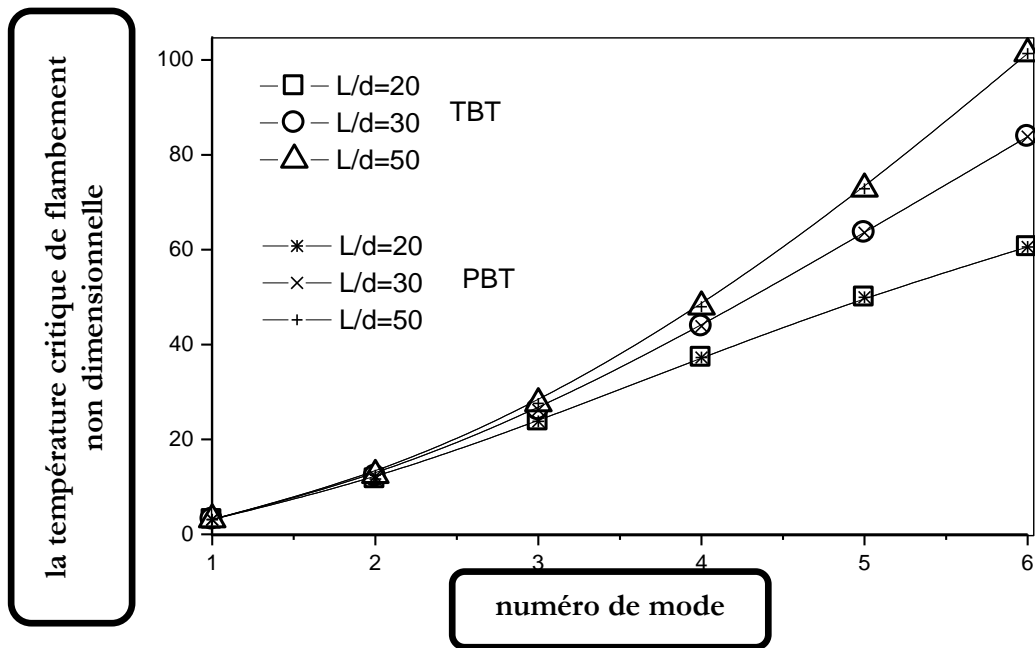


Fig.IV. 2 : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle et le numéro de mode avec différentes valeurs de  $L / d$ . Le coefficient d'échelle  $e_0a = 0,4 \text{ nm}$ .

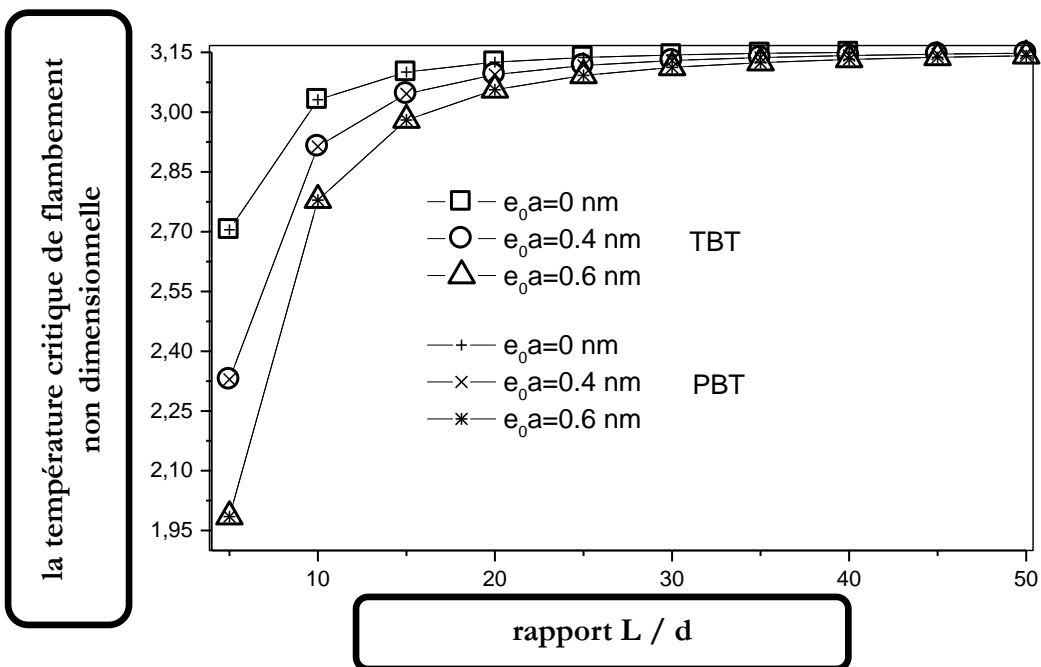


Fig.IV. 3 : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de  $L / d$  avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 1.

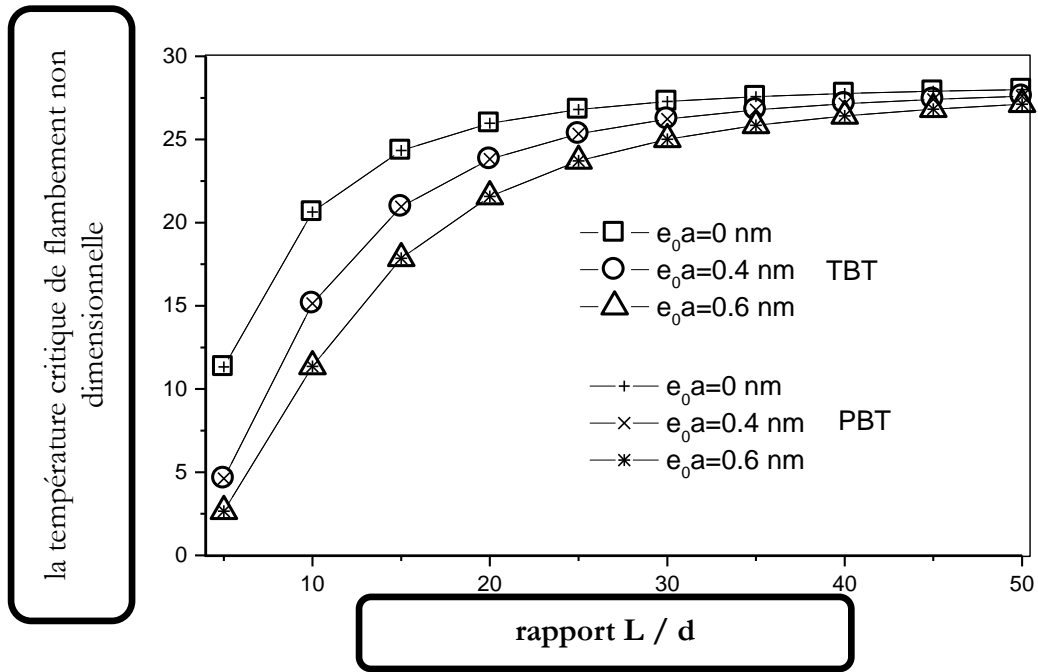


Fig.IV. 4 : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de  $L / d$  avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 3.

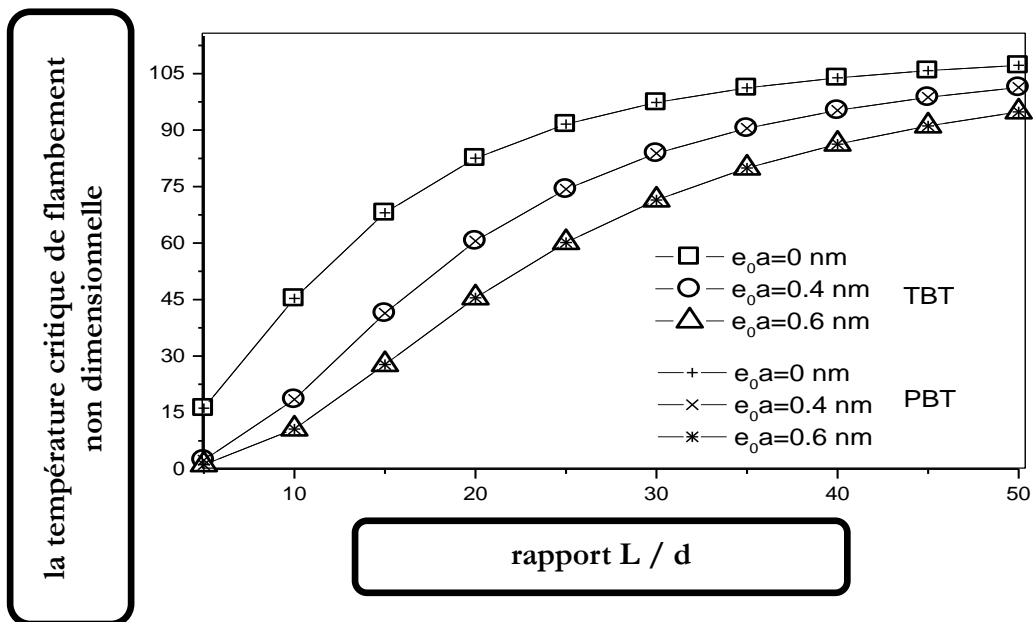


Fig.IV. 5 : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de  $L / d$  avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 6.

ue de flambement  
sionnelle

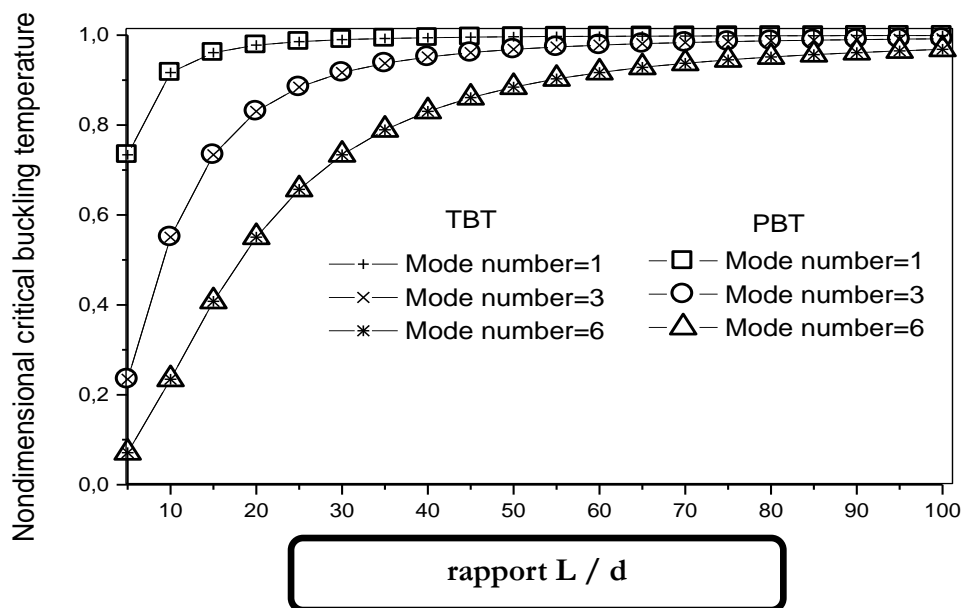


Fig.IV. 6 : Rapport entre la température critique de flambement de (TBT, PBT) et l'EBT non local par rapport au rapport longueur / diamètre avec différents numéros de mode. Le coefficient d'échelle  $e_{0a} = 0.4$

# Conclusion générale

## Conclusion générale

---

Dans ce travail, nous avons étudié le modèle mathématique dans la physique des nanomatériaux.

Le modèle est une représentation miniature de quelque chose utilisé pour casser la complexité d'un système il nous aide en particulier dans l'étude des nano matériaux, ces derniers ayant des propriétés physiques et mécaniques, qui sont utilisés dans plusieurs domaines médicaux et industriels. Mais d'un autre côté, ils ont des dangers qui affectent l'environnement, l'homme et la santé.

Parmi les nano-objets nous avons étudié les nanotubes de carbone en se basant sur le facteur de température critique en cas de faible température ou élevée et nous nous sommes concentrés aussi sur le coefficient de la petite échelle.

Nous avons essayé de donner de faire une petite lueur sur les nanomatériaux, notamment les nanotubes de carbones et leur importance dans différentes études et différents domaines dans le monde nanométrique qui s'étale entre un et une centaine de nanomètres. vu la complexité d'effectuer ce genre d'expérience a cause du manque des moyens et la cherté du matériel, on a opté pour la modélisation. Ainsi, on un choisi un modèle mathématique qui convient à notre étude.

Enfin de compte on a réussi à obtenir des résultats positifs qui montrent l'influence de la petite échelle et d'autre facteurs sur différents matériaux. Avant, avec les formules classiques, les résultats étaient imprécis. Aussi, nous avons utilisé de différents modèles avec différentes théories pour faire la comparaison, comme le modèle de Timoshenko, le modèle d'Euler-Bernoulli et d'autres. Puisque le monde nanométrique et surtout des nanotubes de carbones sont récents et importants pour l'industrie et la recherche scientifique, plusieurs pays misent beaucoup d'argent pour créer des laboratoires de recherche pour aboutir à d'autres résultats et dans des brefs délais.

Enfin, notre perspective est d'élargir notre recherche dans ce domaine des nanomatériaux pour mieux comprendre le comportement de différents matériaux pour bien les exploiter et les adapter à nos divers besoins scientifiques et industriels.

## Abstract:

In this work, the physical and dynamic properties of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) are studied by considering scale effects. Based on the nonlocal theory of elasticity and the principle of molecular dynamics, the equations of motion are determined. The effects of the scale parameter, the number of modes of vibration, the chirality of carbon nanotubes and the dimension ratio on the dynamic characteristics of SWCNTs are discussed. The results obtained showed a significant dependence of natural frequencies on the studied parameters. This work represents a contribution in the physical design of the nanostructures..

**Key words:** single-walled NTC, chirality, scale parameter, vibration, DM, non-local elasticity

## ملخص:

في هذا العمل، تمت دراسة الخصائص الفيزيائية والديناميكية لأنابيب الكربون النانوية أحادية الجدار من خلال النظر في تأثير المقياس. بناء على نظرية المرونة غير المحلية ومبدأ الديناميكا الجزيئية، تم تحديد معادلات الحركة ومناقشة آثار عامل المقياس، وعدد عقد الاهتزاز، وتأثير الشكل الهندسي ونسب الأبعاد على الخصائص الديناميكية للأنابيب النانوية. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها تأثير كبير للترددات الطبيعية على العوامل التي شملتها الدراسة. يمثل هذا العمل مساهمة في التصميم الفيزيائي للبنية النانوية بشكل عام.

**الكلمات المفتاحية:** أنابيب الكربون النانوية أحادية الجدار، معامل المقياس، اهتزاز، مرونة غير محلية.

## Résumé :

Dans ce travail, les propriétés physiques et dynamiques des nanotubes de carbones monoparois (SWCNT) sont étudiées en considérant les effets d'échelle. En se basant sur la théorie nonlocal d'élasticité et le principe de la dynamique moléculaire, les équations des mouvements sont déterminées. Les effets du paramètre d'échelle, le nombre de modes de vibration, la chiralité des nanotubes de carbone et le rapport de dimension sur les caractéristiques dynamiques des SWCNTs sont discutés. Les résultats obtenus ont montrés une dépendance significative des fréquences naturelles sur les paramètres étudiés .ce travail représente une contribution dans la conception physique des nanostructures.

**Mots clés :** NTC monoparois, chiralité, paramètre d'échelle, vibration, D.M, élasticité non-local.

Les données utilisées dans les résultats numériques pour les SWCNT sont les suivants: l'épaisseur de paroi  $h = 0,075$  nm, le rayon moyen  $r = 0,313$  nm, le coefficient de poisson  $\nu = 0,34$ , le module d'élasticité  $E = 1,8$  TPa et la valeur de la dilatation thermique est  $\alpha = 1,2 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$

La variation de la température critique non dimensionnelle et du nombre de modes axiaux est illustrée à la Fig.1. Les résultats obtenus avec la théorie de faisceau de déformation non locale PBT coïncident avec ceux prédits en utilisant la théorie de faisceau de Timoshenko. On peut constater que les résultats basés sur les théories locales et non locales sont presque les mêmes pour les petits nombres en mode. Cependant, en augmentant le numéro de mode, la différence devient évidente. De plus, on peut observer que l'augmentation du paramètre non local provoque la diminution de la température critique.

Comparaison du flambement non dimensionnel à la température critique de SWCNT en avec différents rapports dimensionnels, pour les six premiers modes basés sur le TBT conventionnel non local et PBT non local est illustré à la Fig.2. Comme le montre la figure, les deux théories fournissent les mêmes résultats. On peut constater que l'effet du coefficient dimensionnel sur le flambage critique de la température est significatif en mode élevé et la diminution du rapport dimensionnel réduit la température critique des SWCNT.

La dépendance de la température critique de flambage non dimensionnelle sur le rapport dimensionnel du SWCNT est également illustrée à la figure 3 pour diverses valeurs de paramètre non local. On a constaté que le TBT conventionnel non local et le PBT non local prédisaient des résultats similaires. Les résultats de cette figure permettent de conclure qu'une augmentation du paramètre d'échelle non locale entraîne une diminution de la température critique de flambement. De plus, on peut constater que lorsque le rapport dimensionnel est faible, les effets d'échelle non locale sont importants. Cependant, les effets d'échelle non locale sur la température critique de flambement non dimensionnelle diminueront avec l'augmentation du rapport dimensionnel. Cela implique que les effets non locaux sur les caractéristiques de flambage thermique ne sont pas évidents pour les SWCNT minces, mais doivent être pris en compte pour les SWCNT courts.

Les figures (4+5) montrent que la température critique non dimensionnelle change en fonction des rapports dimensionnels ainsi que le facteur de la petite échelle. La température critique augmente si le rapport dimensionnel augmente et si le coefficient non local diminue, en prenant  $n=3$  et  $n=6$ . On peut constater la différence entre les deux cas facilement.

Afin de démontrer les effets de la déformation par cisaillement transverse, le flambage critique, la température critique non dimensionnelle du SWCNT, au même temps par le PBT



non local actuel et par le TBT conventionnel non local vers le modèle de faisceau non local d'Euler-Bernoulli avec différents rapports dimensionnels est présentée à la Fig.6. Le numéro de mode  $n = 1, 3, 6$  et le coefficient d'échelle  $e_0a = 0,6$  nm sont considérés. La figure.6 montre que, pour différents numéros de mode, tous les rapports sont inférieurs à 1,0. Cela signifie qu'en raison des effets de la déformation transversale par cisaillement, la température critique de flambement du PBT non local est inférieure à celle du modèle de faisceau d'Euler Bernoulli non local. Ce phénomène est plus évident pour les nombres de mode plus élevés et les rapports dimensionnels plus faibles. Cela signifie que les effets de la déformation par cisaillement transversal doivent être pris en compte et que le PBT non local est plus précis pour les nanotubes de carbone court.



***LISTE DES  
ABRÉVIATIONS***

## Liste des abréviations

IWM : *Das Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (Fraunhofer Institute for Mechanics of Materials)*

MOF : *Metal-Organic framework nanoparticles*

INRS : *Institut national de recherche et de sécurité*

CVD : *Chemical Vapor Deposition*

SWNT : *Nanotube de carbone simple paroi (Single-Walled carbon NanoTube)*

MWNT : *Nanotube de carbone double paroi (Multi Walled carbon NanoTube)*

TPa : *Terapascal*

GPa : *Gigapascal*

AFM : *Microscopie à force atomique*

PMMA : *Le polyméthacrylate de méthyle*

PCR : *Température critique de flambement*

TBT : *Timoshenko beam theory*

PBT : *Present beam theory*

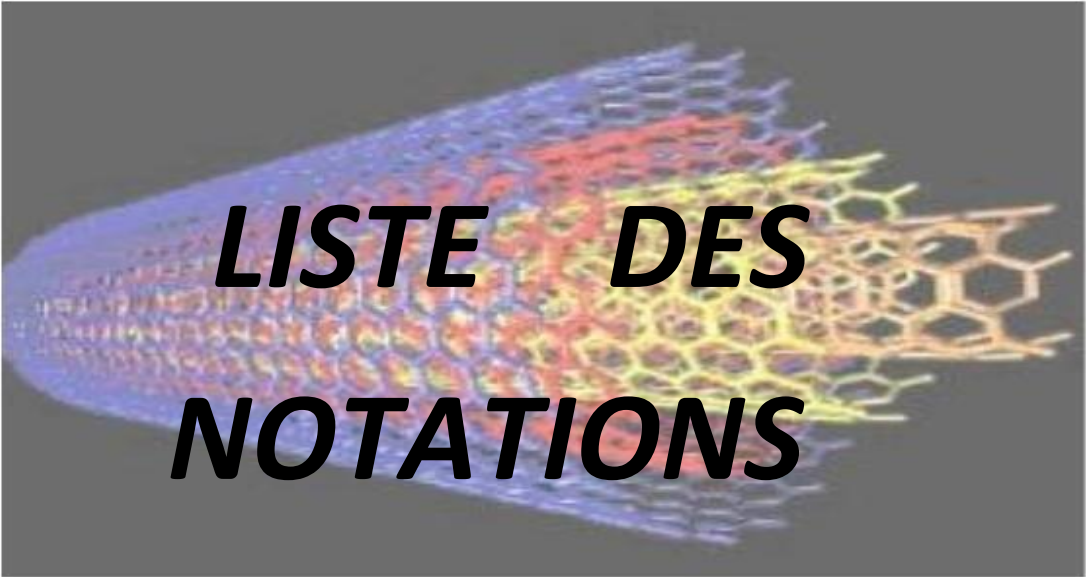
EBT : *Euler beam theory*

MEB : *microscopie électronique à balayage*

C<sub>60</sub> : *Fullerène C60*

C<sub>70</sub> : *Fullerène C70*

C<sub>80</sub> : *Fullerène C80*



***LISTE DES  
NOTATIONS***

# Bibliographie

## Bibliographie

- [1]: Kai Velten, *Mathematical Modeling and Simulation: Introduction for Scientists and Engineers*, 2009.
- [2]: Philippe Etchecopar et Céline Saint-Pierre , Démarche de modélisation en mathématiques, Activité pédagogique réalisée au Cégep de Rimouski.
- [3]: C. William McCurdy et autre, *Theory and Modeling in Nanoscience*, Department of Energy 2002
- [4]: La modélisation mathématique, Centre d'aide en mathématiques, HEC Montréal.
- [5]: La modélisation mathématique, Centre d'aide en mathématiques, HEC Montréal.
- [6] : Marc ATTEIA , *Physique et Mathématiques*, 2 juillet 2015.
- [7]: La modélisation mathématique, Centre d'aide en mathématiques, HEC Montréal.
- [8]: La modélisation mathématique, Centre d'aide en mathématiques, HEC Montréal.
- [9] : <https://www.iwm.fraunhofer.de/en/why-fraunhofer-iwm/core-competencies-technical-possibilities/material-modeling-and-simulation.html> 19/04/2019
- [10] : <https://www.hindawi.com/journals/complexity/2018/5083247/> 17/04/2019
- [12] : Les nanomatériaux Professeur tuteur : Pierre DAVOUST LE MOROUX Gwenaëlle MOY Romain 2<sup>ème</sup> année HSE
- [13] : F. A. Cotton, G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, 1998, 5<sup>ème</sup> édition, John Wiley & Sons, New York
- [14] : H. O. Pierson, *Handbook of carbon, graphite, diamond and fullerenes : properties, processing and applications*, 1993, Noyes Publications, Park Ridge.
- [15] : Nanotubes from carbon, P. M. Ajayan, *Chem. Rev.*, 1999, 99, 1787-1799
- [16] : HOUDYP., DUPASC., LAHMANIM.– *Les nanosciences. 1- Nanotechnologies et nano-physique. La collection Échelles*, Éditions Belin, 2006, 735
- [17]: Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes, J. W. G. Wildöer, L. C. Venema, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, C. Dekker, *Nature*, 1 January 1998, 391, 59-61.

## Bibliographie

---

[18]: **h** Myriam RICAUD , Dominique LAFON, Frédérique ROOS LES NANOTUBES DE CARBONE : QUELS RISQUES, QUELLE PRÉVENTION?

[19]: Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties, M.-F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, R. S. Ruoff, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84, 5552- 5555.

[20]: G. Overney, W. Zhong, D. Tománek, *Z. Phys. D*, 1993, 27, 93.

[21]: B. I. Yakabson, C. J. Brabec, J. Bernholc, *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 76, 2511.

[22]: M. M. Treacy, T. W. Ebbesen, J. M. Gibson, *Nature*, 1996, 381, 678.

[23]: Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties, M.-F. Yu, B. S. Files, S. Arepalli, R. S. Ruoff, *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84, 5552- 5555.

[24]: M. B. Nardelli, B. I. Yakobson, J. Bernholc, *Phys. Rev. B*, 1998, B 57, R4277.

[25]: A recipe for strength, P. Calvert, *Nature*, 1999, 399, 210-211.

[26]: Nanotubes as nanoprobe in scanning probe microscopy, H. Dai, J. H. Hafner, A. G. Rinzler, D. T. Colbert, R. E. Smalley, *Nature*, 1996, 384, 147-150.

[27] : N. Hamada, S. I. Swada, A. Oshiyama, *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 68, 1579.

[28] : Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes, J. Hone, M. Whitney, A. Zettl, *Synth. Met.*, 1999, 103, 2498-2499.

[29] : Broadband optical limiting with multiwalled carbon nanotubes, X. Sun, R. Q. Yu, G. Q. Xu, T. S. A. Hor, W. Ji, *Appl. Phys. Lett.*, 1998, 73, 3632-3634.

[30] : Highly ordered carbon nanotubes arrays and IR detection, J. M. Xu, *Infrared Physics & Technology*, 2001, 42, 485-491.

[31]: Journal of Materials and Engineering Structures Berrabah Hamza Madjid et autres 2016.

## Liste des figures

<b>Figure I.1</b> : Vue de premier ordre de la modélisation mathématique qui montre comment les questions posées dans une approche de construction fondée sur des principes un modèle se rapportent au développement de ce modèle.....	<b>8</b>
<b>Figure II.1</b> : extrait du dossier les nanomatériaux de l'INRS.....	<b>19</b>
<b>Figure II.2</b> : cycle des nanomatériaux de la production à l'exposition des personnes.....	<b>23</b>
<b>Figure III.1</b> : Structure du graphite.....	<b>27</b>
<b>Figure III.2</b> : Structure du diamant.....	<b>28</b>
<b>Figure III.3</b> : Structure du C <sub>60</sub> . Les liaisons C-C communes à un hexagone et un pentagone sont représentées en rouge, les liaisons communes à deux hexagones sont représentées en jaune.....	<b>29</b>
<b>Figure III.4</b> : Du C <sub>60</sub> au C <sub>80</sub> : les atomes ajoutés au C <sub>60</sub> pour obtenir le C <sub>70</sub> et le C <sub>80</sub> sont représentés en rouge.....	<b>29</b>
<b>figure III.5</b> : Nanotube de carbone monocouche.....	<b>30</b>
<b>Figure III.6</b> : Récapitulation des différentes formes allotropiques du carbone abordées dans ce paragraphe.....	<b>30</b>
<b>Figure III.7</b> : Les différents modes d'enroulement des nanotubes de carbone .....	<b>31</b>
<b>Figure III.8</b> : Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube zigzag .....	<b>33</b>
<b>Figure III.9</b> : Repliement d'un feuillet graphène et raccordement de manière à former un nanotube armchair.....	<b>33</b>
<b>Figure III.10</b> : Repliement d'un feuillet graphène, translation d'un bord parallèlement à l'axe du nanotube, puis raccordement de manière à former un nanotube chiral. Cette chiralité provient de son caractère hélicoïdal.....	<b>34</b>
<b>Figure III.11</b> : Représentation du vecteur $\vec{c}_h$ définissant l'enroulement du feuillet graphitique autour de l'axe du nanotube de chiralité (n,m). Par construction, le vecteur $OM = \vec{c}_h$ est perpendiculaire à l'axe du tube.....	<b>35</b>
<b>Figure III.12</b> : Nanotubes de carbone multi-feuillets Multi-wall carbone nanotubes.....	<b>35</b>



## Liste des figures

---

<b>Figure III.13</b> : Utilisation d'un nanotube multicouche comme pointe AFM.....	<b>40</b>
<b>Figure III.14</b> : Images AFM en mode tapping d'une tranchée de 400 nm de large et de 800 nm de profondeur.....	<b>40</b>
<b>Figure III.15</b> : Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monocouches en fonction de leurs indices de chiralité (n,m).....	<b>42</b>
<b>Figure III.(16 , 17)</b> : Nanotubes de carbone multi-feuillets observés en microscopie élec.....	<b>45</b>
<b>Fig IV.1</b> : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle et le numéro de mode avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). La valeur de $L/d$ est 20.....	<b>52</b>
<b>Fig.IV. 2</b> : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle et le numéro de mode avec différentes valeurs de $L/d$ . Le coefficient d'échelle $e_0a = 0,4$ nm.....	<b>52</b>
<b>Fig.IV. 3</b> : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de $L/d$ avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 1.....	<b>53</b>
<b>Fig.IV. 4</b> : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de $L/d$ avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 3.....	<b>53</b>
<b>Fig.IV. 5</b> : Relation entre la température critique de flambement non dimensionnelle ( $P_{cr}$ ) et la valeur de $L/d$ avec différents coefficients d'échelle ( $e_0a$ ). Numéro de mode = 6.....	<b>54</b>
<b>Fig.IV. 6</b> : Rapport entre la température critique de flambement de (TBT, PBT) et l'EBT non local par rapport au rapport longueur / diamètre avec différents numéros de mode. Le coefficient d'échelle $e_0a = 0,4$ .....	<b>54</b>

## Liste des Notations

$\Theta$  : Angle chiral

$\vec{a}_1, \vec{a}_2$  : Les vecteurs de base du graphène

$\vec{c}_h$  : Vecteur chiral

$(\mathbf{m}, \mathbf{n})$  : Un couple de nombres entiers qui définit la structure du nanotube

$L$  : Longueur de la poutre

$h$  : Epaisseur de la poutre

$w_b$  : Composante de la flexion du déplacement transversal

$w_s$  : Composante du cisaillement du déplacement transversal

$f(z)$  : Fonction de forme

$\varepsilon_x, \gamma_{xz}$  : Composantes de déformation

$\tau_{xz}$  : Contrainte tangentielle

$\delta U$  : La variation virtuelle de l'énergie de déformation

$\delta V$  : La variation virtuelle de l'énergie potentielle

$\delta K$  : La variation virtuelle de l'énergie cinétique

$q$  : La charge transversale

$\omega$  : La fréquence propre

$\sigma_{xx}$  : Contrainte normale dans la direction  $x$

$\sigma_{xz}$  : Contrainte normale dans la direction  $xz$

$S_i, m_i$  : Eléments de la matrice

$\partial$  : Dérivée partielle

$[ ]$  : Matrice

$\{ \}$  : Vecteur colonne

$Q_n$  : Amplitude de charge

## Liste Des Notations

---

$\delta u_0, \delta w_b, \delta w_s$  : Champ virtuel de déplacement

$t$  : Le temps

$K_s$  : Constante de rigidité de cisaillement pasternack

$N, M_b, M_s$  : Les efforts résultants

$e_0 a$  : Le coefficient de la petite échelle

$G$  : Le module de cisaillement.

$h$  : L'espacement entre les couches d'un nanotube de carbone.

$a$  : La longueur de la liaison carbone-carbone

$L$  : La longueur du nanotube de carbone

$L/d$  : Le rapport longueur/diamètre

$M$  : Le moment de flexion

C-C: La liaison carbone-carbone

## Liste des tableaux

<b>Tableau II.1</b> : les principaux secteurs utilisant les nanomatériaux et exemples.....	<b>22</b>
<b>Tableau III.1</b> : Les caractéristiques dimensionnelles des nanotubes de carbone .....	<b>37</b>
<b>Tableau III.2</b> : Quelques propriétés mécaniques des nanotubes de carbone.....	<b>39</b>
<b>Tableau III.3</b> : Quelques caractéristiques thermiques des nanotubes de carbone .....	<b>42</b>